

# TERAFLOP

## La màquina de memòria compartida més gran de l'Estat

ENTREVISTA

Núria López, distingida pel Consell Europeu de la Recerca

Reptes en la gestió d'e-infraestructures a l'11a TSIUC

e-Vot, nou servei per a les universitats de Catalunya







# La màquina de memòria compartida més gran de l'Estat

Els usuaris del Centre ja poden accedir al supercomputador de memòria compartida més gran de l'Estat. Es tracta de *pirineus*, un Altix UV 1000, amb un total de 1.344 nuclis de càlcul, 6,14 TB de memòria i un rendiment punta ( $R_{punta}$ ) de 14,30 Tflop/s. *Pirineus* arriba per reemplaçar l'Altix 3700, en funcionament des de 2005, i amb 128 processadors i 384 GB de memòria. Així, el nou Altix permetrà afrontar nous reptes en recerca, gràcies a la seva arquitectura i grans recursos de memòria. Amb la instal·lació del nou Altix UV 1000, d'SGI, el rendiment punta global del Centre ha passat de 5,45 Tflop/s a 19,75 Tflop/s.

En l'actualitat, tots els supercomputadors del Centre registren un nivell d'utilització superior al 90%, dificultant l'execució de treballs paral·lels de més de vuit processadors i estenent el temps d'espera pels projectes amb grans requisits de memòria i disc. El nou maquinari, que aportarà 968.000 hores computacionals (HC) mensuals, ajudarà a solucionar aquests condicionants i permetrà donar servei a nous projectes.

El nou Altix va arribar el passat 10 de setembre i a l'octubre, després de la seva configuració i de realitzar els tests d'operació, s'hi van executar els *benchmarks*. Al novembre hi van començar a córrer els primer treballs de prova. Per a aquest període de proves, es va obrir una convocatòria extraordinària i es van concedir un total d'1.680.000 HC a 35 grups de recerca.

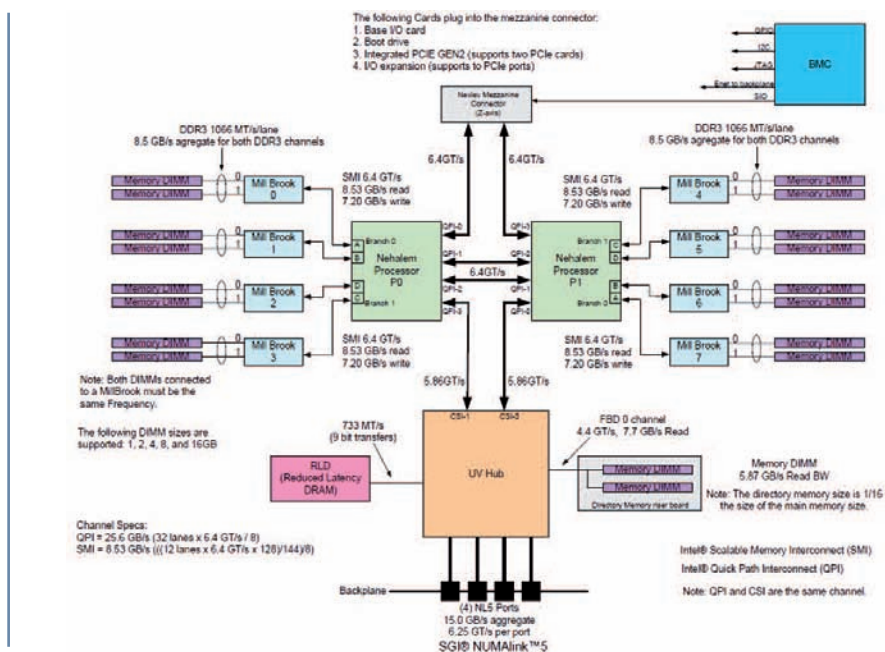
## Característiques tècniques

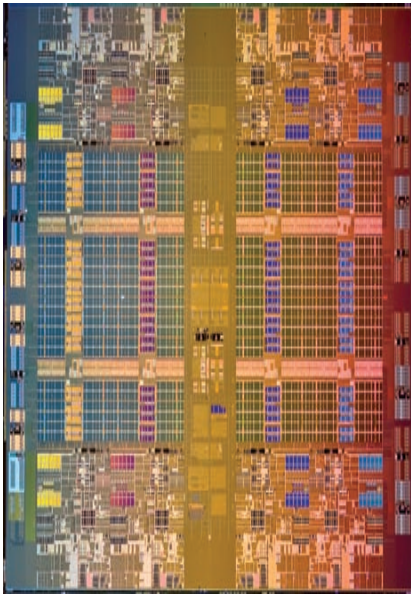
L'Altix UV 1000 és un sistema format per 224 processadors Intel Xeon X7542 de 64 bits, a 2,66 GHz de 6 nuclis, conformant un total de 1.344 nuclis de càlcul, amb 6,14 TB de memòria i 112 TB de disc. Aquest nou equipament pot realitzar 14.300 milions d'operacions de coma flotant per segon.

Els Altix són multiprocessadors amb un disseny de memòria compartida que proporcionen un entorn de treball flexible i competitiu per a les aplicacions característiques dels usuaris del CESCA. Aquesta arquitectura permet, comparada amb un clúster clàssic, treballar amb qualsevol dimensió de node desitjada, sense que cap aplicació típica de clúster (per exemple, programada amb MPI) deixi de funcionar.

Amb la posada en funcionament del nou maquinari s'espera poder satisfer la creixent demanda de potència de càlcul que requereixen els grups de recerca en les diferents àrees de coneixement a que dóna servei el CESCA.

Vista del *blade* i el seu diagrama de blocs





Fotografia a color de les unitats funcionals de la sèrie 7500 del processador Intel® Xeon®. El xip ocupa una superfície de 684 mm<sup>2</sup> amb un total de 2.300 milions de transistors.

Entre els seus avantatges addicionals hi ha el fet que el grau de paral·lelisme no està limitat al nombre de processadors dels nodes i que no presenta restriccions de memòria, compartida de forma eficient per la gran amplada de banda i molt baixa latència de les comunicacions internes. Els sistemes d'arquitectura de memòria compartida Altix UV estan basats en els processadors Xeon que incrementen considerablement el rendiment i l'eficiència dels servidors i proporcionen a la vegada una gran escalabilitat.

Els nuclis de càlcul s'han agrupat en una única partició formada per 1.344 nuclis, però SGI ofereix la possibilitat de crear particions. Una de les configuracions factibles consisteix a agrupar els nuclis en dues particions, cadascuna amb la seva pròpia còpia del sistema operatiu, una de 768 nuclis ( $R_{peak}$  8,5 Tflop/s) i l'altra de 576 ( $R_{peak}$  6,1 Tflop/s). En aquest cas, tots els nuclis podrien accedir a tota la memòria, 6,14 TB (4,57 GB per nucli). L'Altix UV 1000, integrat per 6 IRU (agrupacions de 256 processadors), pot créixer fins a 8 IRU formant un únic sistema de memòria compartida.

L'Altix té un *blade* bàsic amb un parell de discos, en RAID1, per al sistema operatiu i utilitats i ranures PCIe lliures per inserir-hi targetes de comunicacions, GPU, etc. La seva arquitectura és mecanoelèctrica tipus *blade* i està formada

per quatre armaris de 42U que s'alimenten d'una xarxa de potència elèctrica trifàsica. Cada *blade* de computació porta un parell de processadors i fins a 16 DIMM de memòria RAM. Hi ha un cinquè armari que inclou una cabina de discos Infinite Storage 4100 amb 112 discos Fiber Channel (FC) d'1 TB a 7.200 rpm destinada a atendre les necessitats d'espai d'*scratch* de les aplicacions. Aquesta cabina s'alimenta d'una xarxa de potència elèctrica monofàsica.

La comunicació amb la cabina de discos es fa via dos ports FC a 8 Gbps i, amb la xarxa de dades del CESSA, a través d'un port 10 Gigabit Ethernet. Per administrar el sistema hi ha un node especial accessible via web, o també a partir d'una unitat de consola d'1U, que es troba inserida dins d'un dels armaris.

La xarxa interna és de gran velocitat i baixa latència (140 ns) i permet que tots els processadors puguin treballar compartint un mateix espai de memòria, que podria arribar a ser de desenes de Petabytes. El nou Altix funciona amb la distribució Linux SLES de Novell, ja que és l'única versió del sistema operatiu Linux que actualment ofereix un kernel escalable fins a 2.048 nuclis. El servidor treballa amb la distribució estàndard d'SLES pel que s'assegura la compatibilitat amb qualsevol aplicació que funcioni sobre ella.

## El nou Altix ofereix noves oportunitats de càlcul als investigadors

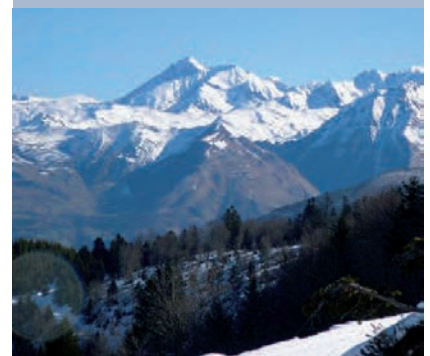
L'Altix UV 1000 va ser adquirida a SGI després d'un procediment obert resolt el passat 7 de setembre, per un import d'1.200.000 €, IVA exclòs, amb subjecció al Plec de clàusules administratives particulars en el seu moment aprovat i a l'oferta presentada per l'adjudicatari, i amb el finançament del MICINN, de fons Feder i de la Generalitat de Catalunya. Aquest nou Altix complementa les funcions del servidor Bull NovaScale, *prades*, posat en marxa el maig de 2009; del clúster de càlcul d'HP, *cadí*, posat en operació el març de 2006, així com les de l'Altix 3700, *obacs*, en funcionament des de febrer del 2005.

Diversos centres internacionals tenen ja en funcionament servidors Altix UV tot i la seva recent comercialització, a partir del passat mes d'abril. És el cas de l'Aliança de Supercomputació d'Alemanya del Nord (HLRN), que disposa de dos sistemes Altix UV 1000 amb un total de 4.352 nuclis i 18 TB de memòria; la University of Tennessee, als EUA, que té un Altix UV 1000 amb 1.280 nuclis i 1 TB de memòria i, a Espanya, la Universitat de València, que ha adquirit un sistema del mateix model amb 26 processadors de 6 nuclis i 832 GB de memòria.

## Els Pirineus

Situats al nord de la Península Ibèrica, els Pirineus conformen una serralada que s'estén des del mar Mediterrani (Cap de Creus), a l'est, fins al mar Cantàbric (golf de Biscaia) a l'oest, i estan delimitats per la depressió de l'Ebre al sud i al nord per la de la Garona. Ocupen 425 km de llargada i una amplada que no supera generalment els 100 km, amb una superfície total de 19.000 km<sup>2</sup>. Ocupen la zona nord de Catalunya, l'Aragó, Navarra, Euskadi i la zona sud del País Basc del nord i de l'Occitània (Bearn, la Gascunya, i Lleugadoc); l'oest i sud de la Catalunya nord i la totalitat d'Andorra.

Entre els pics més alts a Catalunya hi ha la Pica d'Estats, ubicada a Lleida, que amb 3.143 metres d'altitud sobre el nivell del mar és el pic més alt de Catalunya; i el Puigmal que amb 2.913 metres és el més alt de la província de Girona. Ambdós pics són als Pirineus Centrals, mentre que als Pirineus aragonesos hi ha l'Aнето, el pic més alt de la serralada, amb 3.404 metres d'altitud.





## El rendiment de l'Altix UV 1000

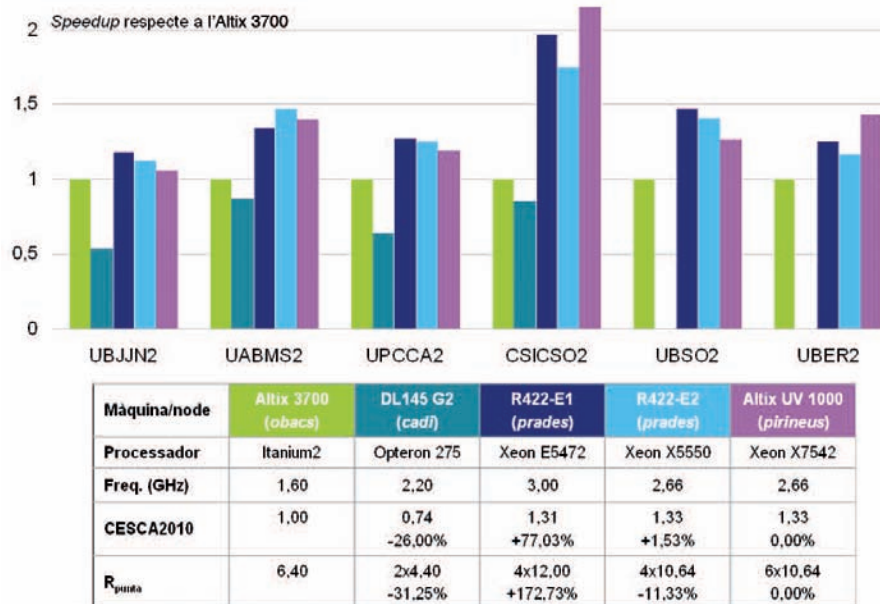
Un cop finalitzat el procés d'instal·lació de l'Altix UV 1000, s'han executat el conjunt de *benchmarks* que avaluen el rendiment del nou maquinari i la seva escalabilitat per a treballs paral·lels. Aquest mateix conjunt de *benchmarks* formava part de les proves per avaluar les ofertes tècniques presentades en la licitació per a l'adquisició d'aquesta nova màquina, conjuntament amb una altra sèrie de *benchmarks* estàndards (linpack, spec, stream, etc.).

Enguany, s'han actualitzat els *benchmarks* del CESCA ja que havien quedat obsolets. Així, per exemple, es necessitava que el temps d'execució d'aquests treballs (els *benchmarks*) fos més llarg amb l'objectiu que fossin representatius de la càrrega real de treball del Centre. Tenint en compte aquests requisits, s'han inclòs aplicacions de diverses àrees de coneixement com ara les ciències de materials, les ciències biomèdiques i de la vida, i les ciències mediambientals. Per definir els nous *benchmarks* s'usen diferents tipus de metodologies i bases, utilitzant tres dels programes de més consum al CESCA, Gaussian, Gamess i NWChem.

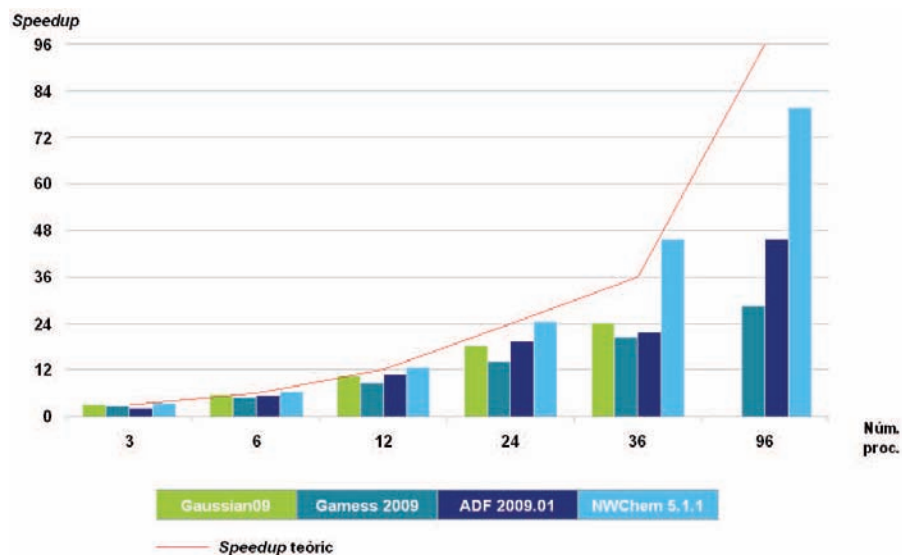
### Els nous *benchmarks* s'han triat en col·laboració amb usuaris representatius de la càrrega majoritària del CESCA

El programari Gaussian ha estat triat principalment pel fet de ser el codi més emprat pels usuaris del Centre, ja que s'emporta prop d'un 75% del total de les hores computacionals (HC) disponibles. A més, és un exemple de càlcul amb un model de paral·lelització openMP. En el cas del treball proposat pel Dr. Carlos Alemán, de la UPC, amb el *benchmark* UPCCA2, es tracta del càlcul d'un oligòmer que és representatiu en el camp dels semiconductors orgànics. Conté la geometria del compost (un dicatió a l'estat electrònic de triplet) optimitzada a nivell UB3LYP/6-31G(d), i s'utilitza per calcular les energies puntuals amb diversos

## El rendiment per nucli dels processadors del Centre



## El rendiment paral·lel de l'Altix UV 1000



mètodes DFT. Des del punt de vista químic, aquests càlculs són interessants per saber com canvia la diferència d'energia del dicatió entre els estats triplet i doblet amb el nombre d'unitats químiques que componen l'oligòmer.

Un altre treball de Gaussian ha estat el proposat per la Dra. Mariona Sodupe, de la UAB. En aquest cas es tracta d'un treball, UABMS2, que empra un mètode numèric, el Coupled Cluster (CC), que originalment va ser formulat al camp de la física nuclear, però que als anys 60

va ser reformulat dins del camp de la química quàntica per poder tractar acuradament la correlació electrònica als àtoms i molècules. Aquests tipus de càlculs CC, tot i ser molt acurats només s'usaven en sistemes d'uns pocs d'àtoms pels seus grans requeriments en memòria i disc. Avui dia però, gràcies al gran increment en els recursos disponibles en les noves màquines, com en el cas del nou Altix UV 1000, es poden abordar càlculs amb desenes, o fins i tot centenars d'àtoms en un temps raonable.



Per últim, s'ha utilitzat un *benchmark* del Dr. Juan J. Novoa, de la UB, UBJJN2, on es combina el funcional PBE0 amb el mètode *counterpoise* per corregir l'error de superposició de base en el càlcul de l'adsorció d'una molècula d'amoniac sobre l'anell aromàtic d'un compost orgànic. Aquest càlcul ha estat utilitzat també en les proves paral·leles per la seva bona escalabilitat.

Per testar el rendiment dels càlculs paral·lels, en aquest cas amb MPI, s'ha triat el programari NWChem. Aquest codi és conegut per tenir un molt bon comportament quan s'utilitza en un nombre elevat de nuclis. En aquest cas, el Dr. Eliseo Ruiz, també de la UB, va proporcionar un exemple que descriu un sistema del camp de magnetisme molecular d'un complex dinuclear de vanadi (IV) que respon a la situació ferromagnètica en què els espins es troben alineats.

Finalment, s'ha utilitzat el codi Gamess, que té una implementació particular del paral·lelisme amb llibreries MPI,

i que és un dels programaris més emprats al món en el camp de la química teòrica i computacional. En aquest cas, s'han utilitzat dos fitxers d'entrada (CSICSO2 i UBSO2) dels Drs. Santiago Olivella i Albert Solé, del CSIC i de la UB, respectivament, d'un treball d'estudis del camp de la química atmosfèrica utilitzant el mètode CASSCF. Aquests *benchmarks* són càlculs mecanoquàntics que utilitzen aquest mètode variacional per tal de millorar la descripció de la funció d'ona dels càlculs SCF convencionals, incloent-hi més d'una configuració electrònica. Aquests tipus de càlculs són necessaris quan el sistema descrit inclou situacions d'energia degenerades o de capes obertes, com és el cas, ja que es tracten radicals peròxids.

Pel que fa a la comparativa del rendiment de les màquines del Centre (vegeu figura 1) s'aprecia que els millors resultats s'obtenen amb aquelles que implementen les sèries X5500 (nous nodes de *prades*) i X7500 (*pirineus*) dels processadors Xeon, tot i tenir un rendiment punta inferior a la sèrie E5400 (nodes originals de *prades*). En particular, amb el nou Altix UV 1000 (*pirineus*) s'obté una millora del 33% si es compara amb l'Altix 3700 (*obacs*).

L'escalabilitat per a treballs paral·lels s'ha avaluat mitjançant els *benchmarks* UBJJN2 (Gaussian09), UBSO2 (Gamess 2009) i UBER2 (NWChem 5.1.1), juntament amb un treball d'ADF 2009.01 (vegeu figura 2). En aquest cas, s'han utilitzat múltiples de 6 (i no de 2 com es venia fent fins ara) ja que els processadors X7542 estan compostos per 6 nuclis. Com a resultat, s'observa un bon comportament del Gaussian en paral·lel, fins a 36 processadors, tot i que segueixen sent els programaris executats amb MPI els que presenten una millor escalabilitat. ■

## Rendiment en *throughput*

L'Altix UV 1000 destaca especialment en les proves realitzades per avaluar el rendiment del maquinari a plena càrrega. Per fer aquesta avaluació es calcula la degradació soferta per un treball de referència (UBJJN2) quan la màquina té tots els nuclis ocupats per dos conjunts de treballs, amb diferents tipus de requisits de memòria i disc. S'ha trobat que la degradació del treball ha estat només d'un 11,9% i un 7,7%, tot i que el node està compost per un nombre molt elevat de nuclis (1.344). Aquests resultats poden ser comparats als obtinguts en un node del clúster NovaScale de Bull, on la degradació havia estat del mateix ordre (7,1% i 7,6%), tenint en compte que es tractava d'un node de només 8 nuclis, en front dels 1.344 del nou Altix.

## Noves tecnologies en CATALÀ!

### Parlem dels tests de referència

Actualment, en l'àmbit de la informàtica, l'instrument utilitzat per a avaluar el rendiment d'un sistema, o d'un component d'aquest sistema, és el **test de referència**. Es tracta d'un conjunt de proves destinades a mesurar la capacitat de les peces de maquinari o de programari d'un sistema per comparació amb altres peces de referència.

Per a designar aquesta noció, el català disposa de la forma normalitzada **test de referència**, tot i que sovint la denominació més utilitzada és el manlleu anglès *benchmark test* o *benchmark* (constituït a partir del formant *bench*, 'banc', i *mark*, 'senyal'). En la decisió adoptada pel Consell Supervisor del TERMCAT a l'hora de fixar la forma **test de referència**, es va tenir en compte, a més del suport dels especialistes consultats, el fet que es tracta d'un terme semànticament motivat, atès que posa èmfasi en el conjunt de paràmetres que serveixen per a comprovar el rendiment del conjunt de programes d'una aplicació, com suggereix la base del sintagma 'test'. Cal afegir, també, que aquesta solució és paral·lela a les denominacions usades en altres llengües per a fer referència a la mateixa noció. És el cas de *prueba de referencia* per al castellà o de *test de performance* per al francès.

A hores d'ara, els tests de referència del CESSA tenen molta feina a mesurar i avaluar el rendiment del nou supercomputador Altix UV 1000.



**termcat**

centre de terminologia

www.termcat.cat

# 35 grups de recerca posen a prova el nou Altix UV 1000

Un cop instal·lat el nou sistema, els investigadors que van sol·licitar-hi hores per a proves han comprovat el rendiment que proporciona a aplicacions com ara Gaussian09, VASP, NWChem, Gromacs, NAMD... amb treballs de fins a 512 processadors. S'han repartit 1.680.000 hores computacionals a 35 grups de recerca tant d'universitats de Catalunya (UB, UAB, URL, UdG i UPF) com de la resta de l'Estat (UV, UPV, UIB i UM), de centres de recerca (CSIC, ICIQ, CRG, IEEC, CIN2, IFAE i CTM) i d'hospitals (HUVH).

Entre els primers investigadors a usar el nou Altix durant el període de proves, perquè el seu programari ja estava instal·lat, hi ha el grup encapçalat per Juan J. Novoa, de l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la UB, que té per objectiu determinar el mecanisme de la transició de fase en el cristall magnètic biestable del TTTA. Aquest cristall és un dels prototipus de materials biestables moleculars. El cristall TTTA presenta dues fases, una diamagnètica a baixa temperatura i una paramagnètica a alta temperatura. El grup ha fet córrer en l'Altix dos treballs simultàniament, un per avaluar la transició de l'estructura de baixa temperatura a la d'alta temperatura, i un altre per avaluar la transició a la inversa. Han usat 256 nuclis, 100 GB de memòria i 50 GB de disc amb el codi CPMD, basat en la implementació de la teoria del Funcional de la Densitat que usa ones planes.

El grup liderat per Agustí Lledós de la UAB també ha usat l'Altix per a l'estudi computacional de l'origen de l'enantioselectivitat en la reacció Suzuki-Miyaura. Un dels descobridors d'aquesta coneguda reacció d'acoblament, Akira Suzuki, ha estat guardonat amb el Nobel de Química en

guany. El grup pretén estudiar computacionalment el mecanisme de reacció d'aquesta primera versió enantioselectiva de la reacció de Suzuki per tal d'esbrinar-ne l'origen, que pot ser clau en el procés de disseny de nous catalitzadors que siguin més eficients per les versions asimètriques d'aquesta reacció. Han usat 64 nuclis, 100 GB de memòria i 300 GB de disc amb el programari Gaussian09.

El grup de recerca de Carles Bo, de l'Institut Català d'Investigació Química, també ha provat l'Altix per esbrinar l'estructura molecular de la nanocàpsula d'urani U28. El treball consisteix en el càlcul de freqüències per als àtoms que es troben dins de la nanocàpsula U28, una operació molt costosa computacionalment, sobretot pel que fa als recursos de memòria. Han necessitat 256 processadors, 1 TB de memòria i el programari ADF.

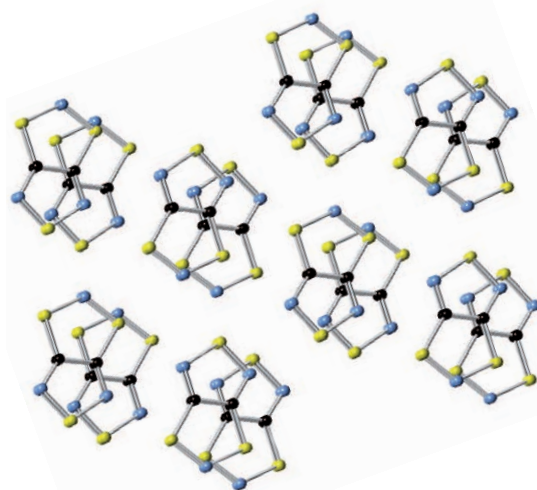
Un altre ha estat el grup d'Eliseo Ruiz de la UB que té per missió l'estudi de la variació de les propietats magnètiques d'imants unimoleculars, en dipositar-los en superfícies metàl·liques, amb possible aplicació en dispositius electrònics, generalment per a emmagatzematge d'informació a nivell molecular. Els càlculs s'han realit-

zat amb 256 processadors i 40 GB de memòria, usant els programaris Siesta i NWChem.

El projecte de recerca participat per Glòria Rodríguez, del Centro de Física de Materiales (CSIC-UPV), ha realitzat simulacions dels processos d'imantació i excitació d'ones d'espín en *arrays* de partícules en estat de vòrtex magnètic. Aquests *arrays* són bons candidats a formar subestructures amb propietats regulables que poden ser utilitzades en la transmissió de senyals electromagnètics sense corrent elèctric, ja que la transmissió del senyal es realitza mitjançant ones d'espín viatjant a través del material. Han usat 32 processadors amb 30 GB de memòria i 300 GB en disc, amb el programari The Object Oriented Micro Magnetic Framework.

Domingo Giménez, de la Universidad de Murcia, ha usat l'Altix per a l'optimització de rutines d'àlgebra lineal densa que s'utilitzen en multitud de problemes científics per a la seva resolució.

Tenen aplicacions reals en medicina i components de radiofreqüència. Han usat 256 processadors i 25 GB de memòria i disc amb les llibreries BLAS, LAPACK i un model de paral·lelització OpenMP. ■





# La plataforma d'e-Vot, nou servei per a les universitats de Catalunya

S'ha posat en funcionament, en fase pilot, la plataforma comuna de vot electrònic e-Vot, que es preveu que estarà totalment operativa l'1 de febrer. Aquest servei permet el vot electrònic i telemàtic garantint la seguretat, la integritat i l'anonimat en el procés, amb un ús senzill. Es tracta del primer d'un conjunt de serveis d'administració electrònica que s'està posant en marxa en col·laboració amb l'Associació Catalana d'Universitats Públiques (ACUP) per introduir l'administració electrònica a la universitat.

Per al comissionat per a Universitats i Recerca, Joan Majó, "aquesta fita reflecteix un esforç intens per part de la Generalitat, els diferents membres de l'ACUP i el CESCO per fer arribar al món universitari un tipus de gestió electrònica que permeti agilitzar processos i serveis i fer-los més eficaços i eficients. A la vegada, aquesta eina comuna facilita la col·laboració entre diferents centres universitaris, així com la compartició no només de recursos, sinó també d'experiències i d'expertesa".

Tot i que algunes universitats catalanes ja havien realitzat de forma electrònica algun procés electoral amb anterioritat, aquesta plataforma permetrà fer-ho de forma permanent, a partir d'una infraestructura comuna, compartint esforços i minimitzant despeses. Al llarg de 2011 es posaran en marxa d'altres serveis, com ara el registre telemàtic d'entrada i sortida o l'arxiu electrònic, que fa-

ran que l'e-Administració esdevingui una realitat al món universitari català.

Des de mitjan octubre, diverses universitats han utilitzat aquest nou servei en diferents processos electorals. La Universitat Politècnica de Catalunya, la pri-

**e-Vot permet realitzar  
processos electorals i  
consultes de forma electrònica  
a totes les universitats  
associades a l'ACUP**

mera universitat en posar a prova l'e-Vot, l'ha usat per a l'actualització anual de representants de l'estudiantat al Claustre universitari, la renovació de les vacants de la Junta d'Escola i els membres de la Comissió Permanent i la Comissió d'Av-



luació Acadèmica de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers de Camins, Canals i Ports, entre d'altres. La Universitat Oberta de Catalunya ha fet servir l'e-Vot per a la comissió de Campus; la Universitat Autònoma de Barcelona per a la tria de representants d'estudiants al Claustre a la Facultat de Ciències Polítiques i de Sociologia i a l'Escola d'Enginyeria; i la Universitat de Lleida, per escollir els representants de l'estudiantat d'Infermeria al Claustre, a la Junta del Centre i al Consell de Departament.

e-Vot permet realitzar processos electorals i consultes de forma electrònica a totes les universitats associades a l'ACUP, però també és oberta a la participació en una fase posterior a la resta d'universitats de Catalunya i als altres centres de recerca adherits a l'Anella Científica. Aquesta plataforma s'allotja al CESCO, qui, juntament amb l'ACUP, dirigeix el seu disseny i implantació, amb la supervisió del seu grup d'usuaris. Les universitats associades a l'ACUP són, a part de les anteriorment esmentades, la Universitat de Barcelona, la Universitat Pompeu Fabra, la Universitat de Girona i la Universitat Rovira i Virgili.

L'eina de vot electrònic i telemàtic, adquirida gràcies a un ajut del Departament d'Innovació, Universitats i Empresa i implantada per ScytI Secure Electronic Voting, garanteix un procés segur i anònim, d'ús fàcil i còmode, que admet múltiples sistemes d'autenticació, a més del recompte i generació d'informes, així com també permet la possibilitat de realitzar-ne auditories abans, durant i després de l'elecció. La plataforma s'integra amb els sistemes informàtics de les universitats permetent la seva administració, i la gestió automàtica del cens i de la configuració de paperetes a través de les eines de gestió electoral de cada universitat. ■

Pantalla d'entrada a la plataforma d'e-Vot a la UPC.

# La capacitat d'unir fàrmacs: un criteri fonamental a l'hora d'escollir una diana terapèutica



D'entre els diversos mètodes terapèutics, el tractament farmacològic destaca per la seva versatilitat, facilitat d'aplicació i eficàcia. Això es fa especialment evident cada vegada que s'aprova un nou medicament que cobreix noves necessitats, com ara els anti-VIH, o que substitueix tractaments més traumàtics, com poden ser els quirúrgics. Malauradament, ni els increïbles avenços biomèdics de les darreres dècades, ni un increment del 1.000% en la despesa han permès augmentar la productivitat de la recerca farmacèutica (vegeu figura 1). En aquest sentit, el grup de Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs (Departament de Físicoquímica, Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona), usuari del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF) del CESCA i liderat per Xavier Barril i F. Javier Luque, té per objectiu eliminar incerteses en el procés de selecció de dianes terapèutiques (vegeu la definició al destacat), desenvolupant noves eines que permeten identificar aquelles proteïnes que poden ser modulades per l'acció de fàrmacs.

“Resulta especialment sorprenent que el nombre de noves dianes terapèutiques s'hagi mantingut constant en els darrers 25 anys, amb una mitjana de 5,4 per any i només l'1,9 d'aquestes dianes terapèutiques es corresponen a noves famílies de proteïnes. Factors de diferent índole han contribuït a aquest fet, però sense cap dubte, un aspecte important ha estat el fet que moltes potencials dianes terapèutiques resulten ser 'immedicables' (*undruggable*, en anglès), a conseqüència que interaccionen poc o gens amb les molècules de tipus fàrmac”, comenta Barril. De fet, alguns components biològics que juguen un paper fonamental (per exemple, l'ADN, l'ARN o les interaccions proteïna-proteïna) són particularment refractaris a la seva modulació farmacològica i, malgrat el seu enorme potencial terapèutic, no se'ls té en compte com a dianes.

Contràriament, els enzims i les proteïnes receptors o transportadors són particularment sensibles a l'acció dels fàrmacs i això es reflecteix en el fet que un 90% de les dianes terapèutiques dels fàrmacs aprovats corresponen a aquests tipus de proteïnes (vegeu la distribució per tipus a la figura 2). No obstant això, “assumir la 'medicabilitat' d'una possible diana terapèutica

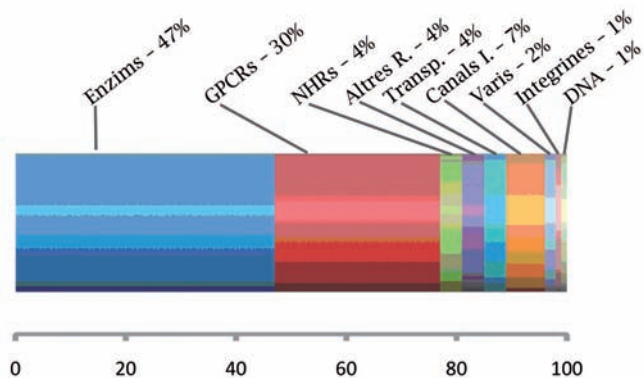
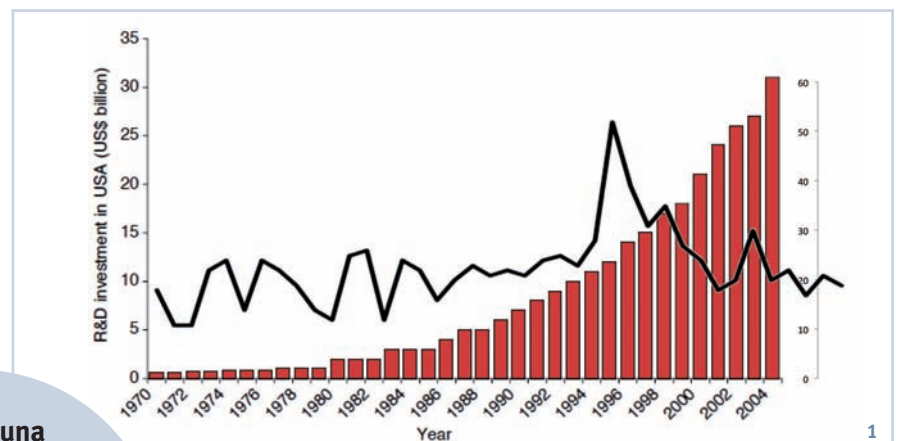
en base a la seva classificació resulta inexacte i antieconòmic”, explica Barril. Per exemple, després de fer costoses campanyes de descobriment de compostos actius, fins a un 50% dels enzims resulten ser 'immedicables'. D'altra banda, cen-

trar-se en les dianes teòricament més 'fàcils' dona lloc a pèrdua d'oportunitats i descarta mecanismes d'acció més innovadors. Per aquest motiu, “ens vam convèncer de la necessitat de poder predir quins llocs en la superfície de les proteïnes tenen la capacitat d'unir molècules de tipus fàrmac amb alta afinitat”, comenta Barril. De fet, “hem desenvolupat dos mètodes radicalment diferents, pensats per ser aplicats en tàndem”, afegeix.

El requisit essencial del primer mètode era que havia de ser ràpid i automàtic, per tal de poder processar milers d'estructures cristal·logràfiques en poc temps. Per aquest motiu, es va optar per un mètode paramètric, entrenat amb un conjunt de cavitats de proteïnes a les quals es coneix la seva capacitat d'unir molècules de tipus fàrmac. El programa *fpocket*, de distribució lliure i desenvolupat per Peter Schmidtke al grup, detecta de forma automàtica totes les cavitats i n'extreu uns descriptors a partir dels quals fa una predicció de la seva 'medicabilitat'. “Tenir accés al Servei de Disseny de Fàrmacs del CESCA ens ha permès comparar els nostres resultats amb l'únic programari publicat que té unes capacitats semblants, el *SiteMap d'Schrödinger*”, explica Barril.

## Què és una diana terapèutica?

Utilitzant la simple però efectiva visió del reconeixement biològic proposat per Emil Fisher, una diana terapèutica és el **pany** al qual li correspon una activitat biològica i el fàrmac, la **clau** que el modifica.





Així, “vam veure que, malgrat ser una eina totalment automàtica, la qualitat dels nostres resultats és igual que la d’altres mètodes que requereixen de la intervenció de l’usuari”, comenta. A més, “per la seva eficiència computacional és l’únic que fa possible l’anàlisi completa de totes les estructures de proteïnes publicades, més de 65.000 al Protein Data Bank (PDB), en uns pocs dies de CPU. Així, hem creat una base de dades que conté tots els llocs d’unió pressuposadament ‘medicables’, i resulta interessant que menys d’una quarta part d’aquestes uneix molècules de tipus fàrmac”, apunta Barril. Aquest fet suggereix l’existència d’un bon nombre de llocs potencialment útils, per exemple, per exercir una modulació al·lostèrica, que en l’actualitat no s’utilitzen.

Els mètodes empírics confereixen uns avantatges de rendiment evidents, però la qualitat dels resultats ve limitada per la composició del conjunt de dades utilitzades per entrenar-los. Atès que els llocs d’unió utilitzats per entrenar el model corresponen majoritàriament a enzims o receptors, existeix la possibilitat que les prediccions per a altres tipus de cavitats (per exemple, un lloc d’interacció proteïna-proteïna) perdin validesa. Pensant en

aquesta eventualitat, “hem desenvolupat un segon mètode de predicció de llocs d’unió de fàrmacs; aquest cop basat en mètodes fisicoquímics”, explica Barril. La raó per la qual les macromolècules biològiques s’associen entre elles o amb els fàrmacs és perquè part de la seva superfície s’estima més interaccionar amb molècules orgàniques que no pas amb ai-

### Xavier Barril “Volem definir quins llocs en la superfície de les proteïnes tenen la capacitat d’unir molècules de tipus fàrmac amb alta afinitat”

gua. Aquesta preferència a desolvatar-se és intrínseca als llocs d’unió i, “tal com s’ha demostrat experimentalment, origina que la majoria de dissolvents orgànics de baix pes molecular s’hi uneixin”, aclareix Barril.

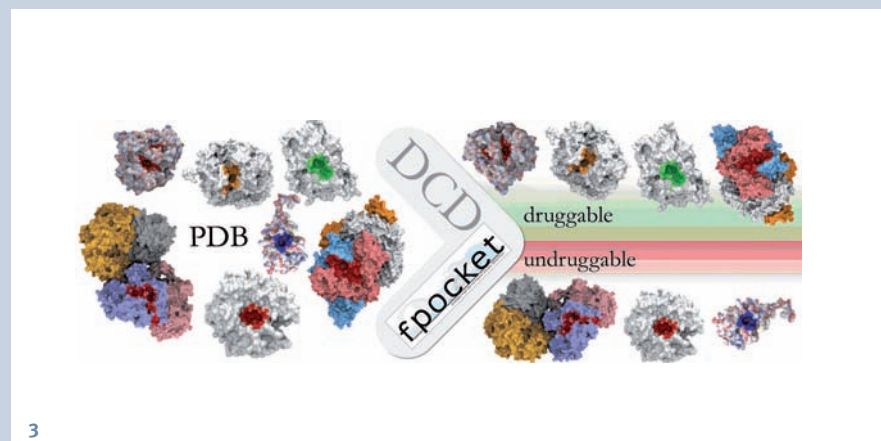
Realitzant simulacions de dinàmica molecular amb una barreja orgànica/aquosa com a dissolvent, es poden reproduir aquests experiments. Si l’espai configuracional solut-solvent es mostreja ex-

haustivament, els mètodes computacionals ofereixen, a més, la possibilitat de quantificar l’energia lliure associada. El mètode s’ha demostrat eficaç per detectar els anomenats llocs d’unió ‘calents’, tant si aquests corresponen a interaccions proteïna-proteïna o proteïna-lligand. Quan diversos d’aquests punts es localitzen a prop en l’espai, es poden agrupar per obtenir una definició natural dels llocs d’unió de molècules tipus fàrmac i per predir quina és la màxima afinitat que podrien arribar a assolir.

Segons Xavier Barril, “la combinació d’aquestes dues tècniques ens ofereix una manera racional d’identificar nous llocs d’intervenció farmacològica. Junta-ment amb altres tècniques de disseny racional de fàrmacs, això ens està servint per explotar nous mecanismes d’acció i, deixant de banda apriorismes, explotar aquelles dianes terapèutiques que ofereixen un major potencial”.

P. SCHMIDTKE, X. BARRIL. “Understanding and predicting druggability. A high-throughput method for detection of drug binding sites”, *J. Med. Chem.* 2010 Aug 12;53(15):5858-67.

J. SECO, F. J. LUQUE, X. BARRIL. “Binding site detection and druggability index from first principles”, *J. Med. Chem.* 2009 Apr 23;52(8):2363-71.

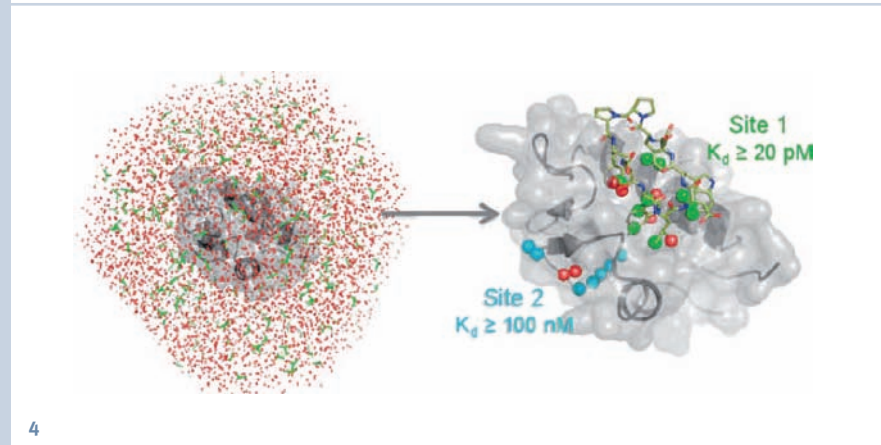


**Figura 1.** Evolució temporal: Nombre de noves entitats químiques aprovades per l’FDA (línia negra) respecte a la despesa en recerca farmacèutica als EUA (barres vermelles). La mitjana és 22 per any, de les quals només 5,4 actuen sobre noves dianes terapèutiques.

**Figura 2.** Distribució per tipus: Els enzims (47%) i receptors (38%) constitueixen la major part de les dianes terapèutiques explotades per a fàrmacs aprovats.

**Figura 3.** Un mètode automàtic (fpocket) detecta cavitats a les superfícies de les proteïnes, extraient-ne paràmetres característics que permeten avaluar la seva capacitat d’unir molècules de tipus fàrmac. El càlcul triga 1 o 2 segons per estructura en un ordinador de sobretaula.

**Figura 4.** Una dinàmica molecular de la proteïna amb solvent explícit (isopropanol/aigua al 20% v/v) permet detectar els llocs on la proteïna mostra afinitat per molècules orgàniques. Mitjançant un tractament estadístic s’identifiquen els llocs d’unió i es quantifica la màxima afinitat que una molècula tipus fàrmac podria assolir-hi. El càlcul tindria una duració d’una setmana utilitzant 16 nodes del nou Altix UV 1000, però no requereix informació empírica.





“No és la primera vegada que la humanitat canvia de font d’energia”

#### ENTREVISTA A NÚRIA LÓPEZ, DISTINGIDA AMB UNA ERC STARTING GRANT

La investigadora Núria López lidera un equip de recerca a l’Institut Català d’Investigació Química (ICIQ) que investiga una nova font d’energia sostenible per a la indústria. En el seu treball en catàlisi heterogènia, destaquen, per exemple, els projectes dedicats a la conversió de biomassa, com ara les plantes, en nous materials químics que puguin servir a la indústria per fer plàstics o qualsevol altre tipus de material. López acaba de ser guardonada amb una European Research Council ERC Starting Grant, una beca de recerca per a joves investigadors concedida pel Consell Europeu de la Recerca d’una quantia d’un milió i mig d’euros. Aquesta concessió suposa d’una banda, el reconeixement d’un projecte de recerca, que permet a aquest grup de l’ICIQ poder continuar amb la seva tasca de forma independent. De l’altra, el reconeixement a una feina desenvolupada al llarg de quinze anys de recerca dedicats al món de la Química Teòrica.

**Acaba de ser distingida amb l’ERC Starting Grant. Què suposa per a vostè aquest reconeixement en un grau professional i personal?**

L’ERC Starting Grant suposa un pas endavant en la meua recerca a l’ICIQ. Ens permetrà engegar un nou projecte i tenir els recursos necessaris i la massa crítica necessària per poder-ho dur a terme d’una manera raonable i en el temps previst. Estic encantada, sobretot perquè en un període de crisi es donarà feina a sis persones com a mínim durant cinc anys, i això no ho pot dir gaire gent. A més, és un tipus de feina d’un alt valor específic, per a professionals molt entrenats i que, a la

vegada, permet formar gent. La part més important de la beca és precisament aquesta, que tindrem la capacitat de formar persones. En un grau personal, em suposa una gran alegria per un reconeixement després de més de 15 anys dedicats a la recerca.

**Per què va decidir dedicar-se a la recerca?**

Perquè m’agraden els camins difícils. La recerca és un dels pocs camps en què s’està de la banda en què mai ningú no ha fet alguna cosa. Aquí hi ha una semblança amb l’art i, donada la meua falta de dot artística, només em quedava dedicar-me a la recerca.

**Porta quinze anys treballant en recerca, ens podria fer un breu recorregut sobre la seva experiència en el món de la Química?**

Des que vaig començar a fer la tesi a Barcelona, sempre m’he dedicat a la Química Teòrica, bàsicament perquè era en aquell moment i és encara ara la part de la Química que més m’agrada. A la vegada, sóc molt maldestra i el laboratori no se’m donava gaire bé. La idea fonamental era que el tipus de càlcul que feia consistia en uns sistemes molt petits i que estaven molt reduïts. Destacaria el fet que durant aquests quinze anys he tingut la sort de viure l’explosió, d’alguna manera, d’aquest camp. El tipus de sistemes que podem fer ara són molt més grans, així com la correlació que hi ha amb els experiments i la capacitat de predir que tenim ara és infinitament major del que era l’any 1995. Per tant, he estat afortunada de poder seguir tot aquest canvi i espero poder veure encara moltes més coses.

**Actualment lidera un grup de treball que investiga la catàlisi heterogènia. En què consisteix exactament el seu projecte de recerca?**

Quan es vol fer una reacció química, és a dir, que un compost o una col·lecció de



compostos es transformi en un altre, en moltes ocasions els requeriments energètics són tan grans que el procés no es pot fer o seria molt costós. La catalisi consisteix a afegir un mitjancer, un altre material, el catalitzador, que fa que la reacció que abans no es podia fer, ara sigui realitzable. Hi ha molts tipus de catalitzadors. Les persones estem plenes de catalitzadors, perquè tots els enzims que tenim al cos són catalitzadors que permeten fer totes les reaccions químiques del nostre organisme. Però, com a persones, ens hem construït una col·lecció de catalitzadors externs amb els que podem fer tota mena de coses, com ara plàstics o adobs pel camp. Tot el que es pugui pensar està fet amb catalitzadors, i els que més es fan servir a la indústria són els catalitzadors heterogenis. Heterogenis només vol dir que en comptes d'estar en una dissolució, com seria el cas dels catalitzadors que tenim al nostre cos, el catalitzador està en una fase diferent (és a dir sòlid, líquid i gas, però també oli i aigua) als reactius.

Fins ara, el tipus de simulació que podríem fer només permetia treballar amb molècules molt petites. En els últims anys, els algorismes de càlcul són més bons, les màquines que tenim a l'abast són molt millors i ens permeten fer molts més processos i podem calcular sistemes més grans. El nostre objectiu és calcular materials que ja són més rellevants de la part química, perquè tenen diversos grups funcionals, és a dir, molècules que poden fer diverses coses que fins ara no s'havien fet.

D'entre aquests projectes, els més atractius són aquells que estan dedicats a la conversió de biomassa, com ara les plantes, en nous materials químics que puguin ser *building blocks*, que són les unitats més petites que després la indústria pot processar per fer plàstics o qualsevol altre tipus de material.

La idea del projecte és canviar la direcció, de manera que els *building blocks* no tinguin el seu origen en el petroli, sinó en la biomassa. La Unió Europea té molt d'interès en aquesta línia de recerca, perquè té com a objectiu que al 2030 el 30% dels *building blocks* tinguin el seu origen en la biomassa. Actualment estem al voltant d'un 10%.

#### **Quin material utilitza per catalitzar?**

Materials de qualsevol tipus, preferentment sòlids inorgànics, que poden ser tant metalls com òxids, sulfurs o nitrurs.

L'or és un de tants. La química de l'or es va descobrir a finals del 80, quan el científic japonès Masatake Haruta va descobrir que les petites partícules dividides d'or són químicament molt reactives. Quan s'aconsegueix aquesta divisió sorgeix una química extraordinària, perquè és extraordinàriament selectiva. Des del punt de vista de síntesi és d'alguna manera meravellosa. Vaig treballar durant molt de temps amb aquest tipus de catalitzador, al llarg de la meua estada a Dinamarca per fer el postdoctorat. És una àrea molt nova i atractiva pel fet d'aconseguir un catalitzador selectiu d'una cosa que no és activa. Visualment és una idea bella, ja que inclou la idea de l'or com a metall preciós, que perdura en el temps i el fet que quan es necessita un catalitzador que sigui el millor de tots, també es fa d'or.

## **“L'objectiu del projecte és que els *building blocks* no tinguin el seu origen en el petroli, sinó en la biomassa”**

#### **Quines aplicacions pràctiques té el projecte en què estan treballant?**

Cal reconvertir tot el que hi ha a la indústria europea en l'actualitat en una base que no inclogui petroli. El que nosaltres podem fer és reduir el nombre de candidats possibles per a una determinada transformació. És a dir, buscar catalitzadors i de mil que en provem, potser hi ha dos o tres que considerem que són possibles *targets*. Això no vol dir que després al laboratori funcionin. Però sí que podem fer una preselecció que pot ajudar molt a reduir el que se'n diu temps d'accés al mercat, el temps que es necessita des que tens la idea d'un determinat procés o producte en arribar al mercat.

#### **La substitució dels *building blocks* creats amb petroli per d'altres creats a partir de biomassa suposaria una revolució en la indústria que avui dia coneixem?**

Sí, el que hem d'aconseguir entre tots és canviar la nostra indústria, bàsicament perquè en breu no es podrà finançar una indústria basada en el petroli. Si no hagués vingut aquesta etapa de crisi en la

que estem immersos, ara estaríem davant uns preus de petroli desorbitats. Aquesta energia s'acaba. Els nous recursos d'aquest tipus d'energia són molt difícils d'obtenir, cada cop més, perquè estan a llocs més estranys i són més contaminants. No obstant això, no és la primera vegada que la humanitat canvia de font. Hem canviat de la biomassa al carbó, del carbó al petroli, i no ha passat res. L'única cosa que hem de fer és pensar-ho amb temps i destinar prou fons a la recerca.

#### **Al llarg de la seva trajectòria professional vostè ha treballat en diversos projectes de recerca, és el cas del grup liderat pel professor danès Jens K. Nørskov. Tenint en compte aquesta trajectòria i experiència, i el fet que actualment vostè dirigeix el seu propi grup de recerca, com valora la investigació que s'està duent a terme a Catalunya i per extensió a Espanya amb la que es fa a Europa?**

Jo crec que tant el nivell del centre com el del nord d'Europa és millor que el nostre i quan em refereixo al centre i al nord d'Europa vull dir els països escandinaus, Alemanya, Anglaterra, Suïssa i Holanda. Sobretot aquests països tenen un vessant experimental molt gran que està recolzat per les companyies del propi país. A nosaltres ens manca aquest suport. Primer, perquè fer experiments és car, és necessari dedicar-hi temps i de vegades hi ha coses que surten i de vegades altres no. I segon, perquè no tenim multinacionals o companyies amb ganes d'engegar projectes per posar aquesta tecnologia a l'abast de tothom. Fa un temps, en l'àmbit de la Química, sí que havia existit un recolzament empresarial, però ho vam perdre amb la venda de les farmacèutiques a finals dels anys 80.

No crec que estiguem a un primer nivell europeu, i no em vull comparar ni amb Portugal, ni Irlanda, ni amb Grècia, perquè per anar endavant l'única cosa que s'ha de mirar és qui va davant teu, no has de mirar enrere, ni el teu origen. Hem de mirar cap endavant. Els nostres grups de recerca en Química Teòrica són bons, perquè hem tingut més accés als recursos. Però en la part experimental ens falta, perquè l'accés als recursos ha estat menor. Ens falta gent preparada i que les nostres companyies vinguin amb un problema i ens diguin, d'això què podeu fer?

A la vegada, el govern espanyol dedica pocs diners a la recerca, fet que se suma al comentat anteriorment de la fal-



Fa quinze anys, Núria López es va graduar en Química amb honors a la Universitat de Barcelona, centre on uns anys després va aconseguir el grau de doctora en Química Teòrica “cum laude”. Va realitzar una estància postdoctoral en el Center for Atomic-scale Materials Physics amb el professor Jens K. Nørskov (Dinamarca). El 2004 va ser nominada professora distingida pel Departament d'Universitats Recerca i Societat de la Informació (DURSI) a la categoria júnior (menors de 41 anys). Al novembre de 2005 va començar a treballar a l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), on en l'actualitat lidera un grup de recerca centrat en la investigació teòrica en catàlisi heterogènia.

ta d'inversió de capital privat. A més, en el context econòmic actual, la recerca s'ha convertit en un dels àmbits on és més fàcil retallar pressupost. Això el que fa és posar traves, ja que si el finançament no és estable i tampoc ho són les normes, que es van canviant molt sovint, el sistema és inestable i es fa difícil treballar. Aquest fet també repercuteix en els nostres joves, que perden l'energia i les ganes de fer. Si es van canviant les regles del joc, és difícil saber què passarà d'aquí a un parell d'anys. Ja no es tracta ni de l'estabilitat de les places, sinó de que de cop i volta l'aixeta es tanqui.

**I aquest problema de finançament es dona en tots els àmbits de la recerca?**

Hi ha un problema en el tipus de recerca que nosaltres fem. Ara seré una mica crítica amb la biomedicina. El fet inevitable que tots ens hem de morir, unit al fet que molts de nosaltres hem viscut de prop el patiment d'un ésser estimat re-

lacionat amb una o una altra malaltia, fa que sigui més fàcil aconseguir diners per invertir en un projecte de l'àmbit de la biomedicina. En canvi, costa més d'aconseguir finançament per un altre tipus de recerca que potser és més abstracta o no sembla tan propera. No s'és conscient que el dia que s'acabi el petroli, s'ha de tenir una altra font d'energia. Perquè no és un problema del dia en què s'acabi el petroli, sinó que 20 anys abans no el podrem pagar. Sense una altra font d'energia, si s'acaba el petroli, s'acaba la societat.

**Enguany deu de les tretze Starting Grants concedides a projectes espanyols han destacat projectes de recerca catalans. Com valora aquest fet i què opina del recolzament català que es fa a la recerca?**

Ho valoro molt positivament. Des de fa uns anys a Catalunya les coses es fan d'una manera molt raonable, com s'han de fer. Jo encoratjaria el nou govern a con-

tinuar fent el mateix que s'ha fet durant aquests anys i a recolzar els investigadors i a donar a la gent jove, com era el meu cas quan vaig arribar a l'ICIQ, les oportunitats per créixer sols desenvolupant les seves idees. En altres centres de recerca, m'hauria resultat impossible fer-ho. Als instituts aquesta porta se'ns ha obert, i de fet aquí som 19 directores de grup i dos dels joves i un dels sèniors tenim distinció. La ràtio és prou bona.

**Què destacaria de l'ICIQ com a institut de recerca?**

Tenim espai suficient per desenvolupar la nostra feina de recerca. La col·laboració entre els diversos grups que aquí treballen és molt positiva. En aquest segle la ciència serà segurament supermultidisciplinària, en el sentit que un investigador no anirà enlloc si desenvolupa la seva tasca de forma individual. El que ens permet l'institut és tenir a prop la gent amb la que necessites parlar i fer les coses de forma senzilla. Això es reflecteix en la multitud de col·laboracions que hi ha entre els diferents grups i en la qualitat dels projectes realitzats.

**“La tasca de centres com ara el CESCA i el BSC és crucial i espero que les institucions els continuïn donant suport”**

**Quin paper ocupa el CESCA en el desenvolupament de la seva tasca investigadora?**

Els recursos del CESCA ens permeten fer una part de la recerca relacionada amb sistemes moleculars. La tasca de centres com ara el CESCA i el BSC és fonamental per la nostra recerca. I el dia que ens deixin anar a sistemes europeus compartits, tipus Prace, anirem cap allà. Per a nosaltres és fonamental a més dels recursos que tenim a l'ICIQ, tenir accés a les grans infraestructures, tant que sinó no podríem desenvolupar la nostra feina. Tampoc podria tenir els sis nous membres de l'equip, més el grup actual, i no podríem fer recerca competitiva en aquest marc. Per a nosaltres és crucial i espero que les institucions continuïn donant suport a aquest tipus de centres. ■



# Reptes en la gestió d'infraestructures TIC



D'esquerra a dreta, Llorenç Valverde, Josep Ribas i Miquel Huguet.

**L'onzena edició de la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC), que convoca cada any el CESCA, s'ha celebrat enguany amb la col·laboració de la Universitat Oberta de Catalunya (UOC) al CosmoCaixa. La trobada ha estat dedicada a analitzar els reptes en la gestió d'infraestructures TIC i ha presentat experiències relacionades amb l'administració de centres de processament de dades (CPD) i la informàtica en un núvol.**

Els encarregats d'obrir la trobada han estat Llorenç Valverde, vicerector de Tecnologia de la UOC; Josep Ribas, director general d'Universitats del Departament d'Innovació, Universitats i Empresa de la Generalitat de Catalunya, i Miquel Huguet, director del CESCA. Josep Ribas ha agraït al CESCA l'organització de trobades com ara la TSIUC que "donen l'oportunitat al sistema universitari de compartir experiències relacionades amb la informàtica, ja que les universitats es mouen avui dia en un entorn cada cop més global i per això cada vegada són més necessàries aquestes plataformes de debat, que afavoreixen la compartició del coneixement". D'altra banda, Ribas també ha destacat que "les TIC són la punta de llança amb la qual hem d'afrontar el futur de la universitat i per això cal seguir treballant per generalitzar l'ús de l'administració electrònica".

A continuació, Valverde ha comparat el sector de les TIC amb el de l'electricitat, donant a entendre que "si per aconseguir electricitat endollem un cable, en un futur farem el mateix quan necessitem més potència de càlcul". A més, ha remarcat que en els propers anys "les TIC

s'externalitzaran i estaran molt més a l'abast i que el que cal ara és veure si estem preparats per afrontar aquest canvi de mentalitat".

**Josep Ribas**  
**"Les TIC són la punta de llança amb la qual hem d'afrontar el futur de la universitat"**

Per la seva part, Miquel Huguet ha remarcat que "el 2010 ha estat un any 'dolç' per al CESCA, ja que l'impuls de l'administració al sistema universitari per part de la Generalitat ha fet que el CESCA proveeixi de diverses plataformes comunes a les universitats membres de l'Associació Catalana d'Universitats Públiques (ACUP)". A més, "hem pogut renovar el maquinari de supercomputació amb la instal·lació d'un SGI Altix UV 1000, amb més de 1.300 nuclis, i també l'equipament de commutació i encaminament de l'Anella Científica, tot gràcies al finançament del MICINN, de fons Feder i de la Generalitat de Catalunya" i ha afegit que "la instal·lació d'aquest nou equipament ha

anat acompanyada d'una renovació del nostre centre de processament de dades, amb criteris d'eficiència energètica i sostenibilitat, un exemple del que avui tracta aquesta TSIUC".

La TSIUC'10 s'ha dividit en dues sessions. La primera ha comptat amb cinc ponències en les quals s'han exposat diferents experiències en la gestió dels CPD per part de diversos membres de la comunitat universitària i de centres de recerca. La segona, amb cinc ponències també, ha tractat aspectes relacionats amb els CPD, així com amb la informàtica en núvol com a model de gestió i tecnologia per als centres de dades.

La cloenda ha anat a càrrec de Carles Salvadó, cap del servei de Telecomunicacions de la Secretaria de Telecomunicacions i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya, qui ha agraït la seva presència al més d'un centenar de persones que han assistit a la TSIUC i ha remarcat "la importància del projecte d'inversió que durà a terme l'STSI per fer arribar la fibra de l'Anella Científica arreu de Catalunya i que compta amb set milions d'euros de pressupost". A més, ha afegit, també "s'està treballant per ampliar recursos i poder invertir en infraestructures creant més anelles sectorials, com ara la cultural, la d'automoció o l'audiovisual, que estan ara en fase de proves, i que permetran reduir costos, compartir recursos i coneixement".

La TSIUC'10 ha estat possible gràcies a la tasca duta a terme pel comitè de programa format per Francesc Noguera, de la UOC; Víctor Huerta, de la Universitat Politècnica de Catalunya; Teresa Grané, de la Universitat Pompeu Fabra, i Caterina Parals i Miquel Huguet, del CESCA. La trobada ha comptat amb el patrocini d'Orange i la col·laboració d'UPCnet, SGI i la UOC. ■



Carles Salvadó, a la cloenda.

## Cap a l'eficiència energètica, transformació dels CPD actuals

**Jordi Hernández**  
UAB

L'actual Servei d'Informàtica de la UAB ha estat durant molt de temps un contenidor on s'han vessat tots els projectes amb necessitats de computació i emmagatzematge sense que les infraestructures físiques d'espai, electricitat, seguretat, extinció, temperatura i humitat donessin problemes per assumir el creixement. En els darrers anys hem assolit alguns límits que ens han obligat a refer les instal·lacions auxiliars, com ara el sistema d'alimentació ininterrompuda o l'escomesa elèctrica. El 2003 es va canviar el ritme de creixement tant per la posada en marxa d'una infraestructura de processament de dades científiques molt important (el Port d'Informació Científica, PIC) com per la gran acceptació del nou servei d'allotjament dels recursos informàtics de grups de recerca.

Les primeres actuacions per millorar l'eficiència energètica, en forma de prototipus *in situ* de confinament d'aire fred, separant-lo del calent, van tenir resultats impossibles de valorar. Llavors es va decidir que les proves les faríem en un entorn simulat computacionalment, el que

es coneix com a Computer Flow Dynamics (CFD) o models de dinàmica de fluids simulats per ordinador. Els primers resultats van ser molt encoratjadors. Es va comprovar que el model reflectia els problemes coneguts i ens mostrava d'altres ocults als nostres ulls i les seves causes (remolins d'aire, obstacles amb fort impacte en els corrents d'aire, etc.). Tots els punts d'interès trobats a les termografies reals fetes *in situ* s'anaven trobant en el model computacional quan s'anava refinant i farrant de més detall.

S'ha encarregat a una oficina d'enginyeria la confecció d'un full de ruta sobre com han de ser les nostres inversions dels propers anys, per millorar l'eficiència energètica i sobre com dimensionar els nostres límits físics en cada moment. El resultat ha estat una proposta de sistema de confinament de l'aire calent al darrera del bastidor (*rack*) i posterior extracció per una xemeneia, amb l'avantatge que és un sistema passiu, sense ventiladors. Tot l'aire de la sala està disponible per refrigerar i no es depèn de la reixeta del terra més propera. En aquesta situació de piscina tèrmica es pot augmentar la temperatura de generació fent molt més econòmic el funcionament de l'aire condicionat. L'estalvi esperat supera els 200.000 € anuals i el temps de retorn de la inversió està al voltant dels tres anys.

## L'experiència de la UPC en l'optimització de la gestió de serveis i infraestructures TIC

**José Luis Montero**  
UPCnet

Sovint associem la gestió d'infraestructures a la introducció de nova tecnologia que suposadament ens permet millorar l'eficiència. En realitat, bona part d'aquesta millora és fruit d'un procés de maduració que ja ha de permetre entendre bé els processos de negoci per tal d'aconseguir una gestió d'infraestructures i serveis òptima i de màxima qualitat. En aquest sentit, la UPC, mitjançant la seva empresa UPCnet, posa a disposició de la seva comunitat universitària tota una sèrie de serveis i infraestructures TIC.

L'evolució de la complexitat i el control d'aquests serveis comuns ha comportat la necessitat de definir un nou model de gestió d'infraestructures i serveis. Així, UPCnet ha establert una sèrie d'eixos sobre els quals centrar aquest model per tal d'assolir els nivells de qualitat requerits en els serveis i les infraestructures TIC que ofereix la UPC als seus usuaris. Aquests eixos tenen en consideració aspectes organitzatius (gestió per processos, ITIL, ISO20000, ISO27000), tecnològics (criticitat, disponibilitat, segu-



D'esquerra a dreta, Jordi Hernández, José Luis Montero, Joan Fontcuberta, Dídac López, Gerard Bernabeu i Jordi Guijarro.



retat, eines de suport) i de gestió del canvi (comunicació, formació).

Els resultats de l'aplicació d'aquest nou model de gestió han estat molt satisfactoris, assolint en els darrers dos anys un augment de la productivitat en la gestió d'infraestructures i serveis propera al 25%. Aquest augment de productivitat s'ha desglossat en una reducció de costos, un increment de l'eficiència i productivitat, millores en el temps de lliurament de noves solucions i en l'ampliació dels horaris de serveis.

## Virtualització, núvol, tot com un servei, seguretat, mobilitat, reducció de despeses...

**Joan Fontcuberta**  
UdG

La pressió sobre les infraestructures TIC augmenta dia a dia i l'aparició de nous conceptes com el núvol i la realitat de noves necessitats fa difícil mantenir models clàssics en la seva gestió. La complexitat creixent de la gestió de la infraestructura que suporta els sistemes d'informació fa necessari tendir a una homogeneïtzació de plataformes i una compartició de recursos per mantenir així la competitivitat del servei.

És per tot això que al Servei Informàtic de la UdG es va apostar clarament per la implantació d'una plataforma de virtualització que permetés garantir les necessitats actuals de disponibilitat i continuïtat, i també proporcionés la flexibilitat necessària per ajustar els recursos a la demanda. Aquesta aposta es complementa molt bé amb una arquitectura orientada a serveis, que es poden oferir tant de forma local com des del núvol, depenent del tipus de servei i dels seus requeriments.

Un dels reptes més difícils d'assolir, ha estat sempre el de trobar l'equilibri entre la seguretat i la funcionalitat d'un sistema. La natural mobilitat creixent dels usuaris, l'aparició de nous dispositius mòbils i la col·locació de serveis al núvol ha fet encara més difícil trobar aquest equilibri. Per tal d'intentar aconseguir aquest objectiu, ha calgut redissenyar els mecanismes de seguretat estàtics actuals i basarlos en mecanismes d'identificació i autorització per accedir als serveis i a les apli-

cacions. Al mateix temps, també ha estat necessari garantir la traçabilitat de les operacions disposant un servei centralitzat d'evidències. Per això, estem redissenyant el servei d'identitat digital, potenciant els mecanismes de federació d'identitats i concentrant tant la gestió d'atributs i permisos com la recollida d'evidències.

## Automatització de la configuració en un centre de càlcul

**Gerard Bernabeu**  
PIC

El Port d'Informació Científica (PIC) és un centre de processament i emmagatzematge *grid* i, com a tal, té la necessitat de gestionar desenes de serveis repartits en centenars de servidors amb disponibilitat 24x7, que donen servei a milers d'investigadors arreu del món. Davant la constant necessitat de creixement en capacitat i serveis, es necessita una gestió unificada dels recursos, control del canvi centralitzat i un aprovisionament.

L'aspecte clau per manegar la infraestructura eficientment sense requerir un creixement paral·lel de recursos humans és l'automatització i, per a tal efecte, cal una eina escalable i que ajudi a solucionar el repte que representa la instal·lació i manteniment dels sistemes operatius i el programari desplegat en centenars de servidors. Després d'avaluar diverses solucions, al PIC el juny de 2009 es va començar a implantar un programari GNU anomenat Puppet que, un any més tard, està gestionant aproximadament 600 servidors al centre.

Al PIC s'ha automatitzat la configuració dels servidors, la instal·lació i configuració de les aplicacions (els serveis) i el manteniment de la configuració. Amb eines d'automatització és possible programar la feina de l'administrador de sistemes, aconseguint una configuració autodescriptiva centralitzada i, utilitzant Puppet, de fàcil lectura en un llenguatge declaratiu basat en grafes. El sistema d'automatització s'ha desplegat de tal forma que els administradors dels sistemes treballen en local i pugen els canvis a subversió, el qual els valida a nivell sintàctic, garantint la integritat del sistema i el control dels canvis.

El desplegament d'una eina d'automatització de la configuració ha reduït substancialment el temps requerit per realitzar i propagar canvis de configuració permetent així que l'equip encarregat de la gestió d'aquests servidors disposi de més temps del que es disposava antany, quan el centre oferia la meitat de la capacitat actual.

## Creixement sostenible dels CPD

**Jordi Guijarro**  
CESCA

Durant la darrera dècada i acompanyat de la ràpida evolució de les xarxes d'alta velocitat, s'ha pogut comprovar un creixement desmesurat en el nombre de serveis tecnològics que la majoria d'organitzacions s'han vist obligades a oferir des dels seus CPD. Aquests serveis, que es podrien caracteritzar com de tipus centralitzat, requereixen una base d'infraestructura maquinari que es troba en una contínua evolució. A més, aquesta evolució també ha comportat l'augment dels costos associats al consum elèctric i les necessitats de refrigeració de les infraestructures tecnològiques.

En aquest canvi de paradigma, on l'augment de la necessitat de plataformes tecnològiques ha vingut acompanyada del descens del seu valor d'adquisició i l'optimització del seu ús, ha desencadenat en gran mesura el creixement de la potència necessària en els nostres centres de dades. El que es considerava fa pocs anys entorns amb bastidors d'alta densitat (5 kW), en l'actualitat s'ha convertit en potències elèctriques per bastidor que s'han multiplicat per quatre (20 kW).

L'impacte d'aquestes càrregues, condicionat enormement per la reducció de l'espai físic requerit en unitats informàtiques dels servidors, juntament amb l'aparició d'arquitectures d'alta densitat (*blades*), fan considerar que les necessitats d'instal·lacions tècniques dels CPD actuals s'assemblen en gran mesura a les que ja requerien els centres dedicats a serveis de supercomputació: escenaris on el control de la dissipació de la càrrega i reducció de punts calents en l'àmbit de la climatització ocupen un lloc a considerar en el seu disseny i operativa diària. ■

## Tendències presents i futures en refrigeració de CPD

**Marc Faig**  
AST

L'eficiència energètica és un aspecte cada cop més important dins els CPD ja que el consum elèctric dels equips (servidors, emmagatzematge i xarxa) s'ha disparat. Això es posa de manifest en el fet que en l'actualitat un centre de dades pot tenir un consum mitjà d'uns 300 kW, el que implica un elevat cost en el subministrament elèctric. Amb consums tan elevats és molt important avaluar mecanismes per millorar l'eficiència energètica, ja que una reducció en el consum o un millor aprofitament dels recursos suposa un gran benefici tant econòmic com per al medi ambient.

Modular Natural Free Cooling és un exemple d'innovació en l'ús de CPD patentada mundialment per AST, i que permet la utilització del Free Cooling com a refrigeració amb temperatures de fins a 24° C sense fer servir cap tipus de refrigerador extern i sense penetració d'aire de l'exterior, mantenint un ambient lliure de contaminació i dins dels valors òptims d'humitat relativa.

PUE és una mètrica definida per The Green Grid per mesurar l'eficiència energètica dels CPD. El PUE equival a la potència elèctrica total del CPD dividida per la potència elèctrica total consumida pels

equips de Tecnologia d'Informació (TI). El seu valor teòric és 1, els valors que s'han publicat varien entre 1,2 i 3,5/4 en CPD tradicionals. Un valor d'1 implica que tota l'energia consumida pel CPD pertany als sistemes d'informació; un valor de PUE = 2 indica que el conjunt de les infraestructures del centre consumeixen la mateixa energia que els sistemes. Els valors anuals mitjans als quals pot arribar la nova tecnologia de refrigeració Modular Natural Free Cooling oscil·len d'1,06 a 1,25, depenent de la zona geogràfica, valors que milloren radicalment l'eficiència dels CPD actuals.

## Gestió i suport de serveis en un CPD extern

**Andreu Vilamitjana**  
T-Systems

En una època difícil com l'actual, és freqüent que les empreses recorrin a tercers per a la gestió de les seves infraestructures TIC per tal de centrar-se en el seu negoci principal. Una de les tendències que s'estan produint amb més força és la subcontractació o externalització de serveis, *outsourcing* en anglès.

L'*outsourcing* és la contractació per part d'una empresa d'un proveïdor especialitzat que ofereix una sèrie de sistemes i processos tecnològics a qui pot confiar els seus serveis i amb el que també pot optimitzar el seu negoci. Un dels serveis

que proporciona major efectivitat i seguretat a les empreses és la gestió i el suport de serveis en un CPD, que permet en tot moment a l'empresa accedir als seus serveis i informacions amb total seguretat.

L'externalització de serveis és, actualment, una de les àrees del mercat de serveis que presenta xifres positives i es preveu que la seva demanda creixi en els pròxims tres anys, afavorida per la difícil situació econòmica del país. Però, per garantir-ne l'èxit, el soci a qui l'empresa cedeixi una part dels seus serveis ha de tenir un coneixement molt precís del funcionament de l'empresa, garantir la seva seguretat i també ha de tenir capacitats tan a nivell de consultoria com d'infraestructures.

## Virtualització, *cloud computing* i gestió del centre de dades

**Albert Fabregat**  
Telvent

En un context tecnològic on el nou model de *cloud computing* està d'actualitat, les empreses demanen tecnologia orientada al negoci, amb inversions alineades a les necessitats presents sense que es limiti el futur, i serveis que incrementin la visibilitat i el control, disponibles en cada moment i que possibilitin una dràstica reducció dels costos gràcies a la virtualització, l'automatització i la reducció del consum energètic.



D'esquerra a dreta, Marc Faig, Andreu Vilamitjana, Albert Fabregat, Francesc Noguera, Jordi Mas i Oriol Bes.



La proposta de Telvent es basa en centres de dades amb monitoratge 24x7, *backup* gestionat, accés a internet 99,999%, gestió de les comunicacions (LAN, WAN), administració i operació del servei 24x7 i gestió de les infraestructures.

Aquest servei de virtualització redueix els costos de maquinari en dos terços, els costos de sistema operatiu, d'energia i refrigeració, i de ports xarxa i SAN, així com l'espai físic d'allotjament, que disminueix en més d'un 50%. Així mateix, facilita la gestió al reduir en un 40% el temps d'implementació, ajustar el CPD a les necessitats de la plataforma, optimitzar la utilització i balanceig de les càrregues de treball, millorar la productivitat del personal de TI, automatitzar la gestió de la capacitat i millorar els nivells de servei.

### Cloud computing: un nou model de gestió o una nova tecnologia?

**Jordi Mas**  
Nexica

El ràpid creixement de la Societat de la Informació crea nous desafiaments; s'estima que un trilió de dispositius estaran connectats a internet el 2011 i 550 milions de persones es connecten avui dia a xarxes socials. Amb aquest panorama les infraestructures TIC estan sota una forta pressió i tenen problemes per mantenir-se actualitzades: el 85% de la capacitat dels ordinadors en l'entorn de distribució està infrautilitzada i el 70% del pressupost es dedica a mantenir les infraestructures en lloc d'afegir nous dispositius.

Per aquest motiu existeix la gran necessitat que les TIC ajudin als reptes de negoci: fer més amb menys (reduir inversions i costos d'explotació), minimitzar els riscos (adoptar els nivells de seguretat òptims per a les dades), millorar la qualitat dels serveis (incrementar la qualitat dels serveis i oferir nous productes que ajudin a fer créixer el negoci i reduir les despeses) i agilitzar processos (millorar la capacitat d'oferir nous productes i serveis).

Atès que en l'escenari actual les TIC són complexes, ineficients i inflexibles,



La TSIUC va comptar amb l'assistència de més d'un centenar de persones.

sugereix la necessitat de recórrer a una solució, un model de desenvolupament, flexible i que permeti que es beneficiï tant a la part de negoci com la de TIC. Aquest model de servei és el Nexica Cloud Gestionat, que permet l'accés mitjançant la xarxa, a una àmplia gamma de recursos TIC (xarxa, servidors, emmagatzematge, aplicacions i serveis) que poden ser ràpidament aprovisionats i utilitzats sota demanda.

### Clouds híbrids: és el que esperem?

**Oriol Bes**  
NexTReT

Els clients de l'àrea de TIC, tant direcció com els usuaris, es dirigeixen a ella amb preguntes complicades tals com les següents: per què es triguen setmanes en comprar i arrencar un servidor si Amazon ho fa en minuts? Per què l'àrea TIC costa tants diners si un servidor a Microsoft Azure té un preu de 8,5 cèntims/h? Efectivament el *cloud computing* aporta avantatges innegables i el departament de TIC s'ha de preparar per poder decidir què posar al *cloud* públic, què deixar com està i que pot aprendre del *cloud* per a després aplicar-ho.

Per poder efectuar aquest camí cal estar preparat en diferents fronts. El primer és la independència de maquinari, és a dir, la virtualització és el pas que més

empreses han fet ja. El segon és la gestió i monitoratge, ja que cal disposar d'eines per gestionar un parc cada cop més complex de recursos propis i externalitzats. El tercer són les eines que faciliten aquest camí, com ara l'eina Microsoft System Center. En quart lloc està una provisió i gestió àgil, perquè cal definir les polítiques i procediments per poder respondre de forma ràpida a les necessitats del negoci (si Amazon pot, nosaltres també).

El cinquè lloc l'ocupen les aplicacions distribuïbles, ja que és necessari que les aplicacions no suposin un impediment per adoptar l'arquitectura més adient a la empresa. En aquest sentit, l'arquitectura SOA i les eines de bus de serveis, ho posaran més fàcil. En sisè lloc trobem la gestió de xarxes híbrides, com gestionar les comunicacions (MPLS, internet, VPN, xarxes de tercers...) si hi ha nodes que no sabem ni on són? Ipanema Technologies aporta solucions per a aquests escenaris.

Per últim, trobem la integració d'aplicacions *Software as a Service* (SaaS); cal resoldre la integració entre les diferents aplicacions internes i/o SaaS per tal d'evitar la duplictat d'informació i evitar que l'usuari hagi d'autenticar-se a cada plataforma. Cada organització ha de diagnosticar el seu grau de maduresa en cadascun d'aquests punts i prioritzar les tasques per anar avançant de manera segura cap al *cloud* híbrid. ■

# La Fundació TecnoCampus Mataró-Maresme es connecta a l'Anella Científica

**La Fundació TecnoCampus Mataró-Maresme (TCM) s'ha connectat a l'Anella Científica, en la categoria de Parcs científics i tecnològics, per mitjà de fibra òptica a una velocitat de 100 Mbps. Segons afirma Antoni Uix i Güell, director general de la Fundació, “la connexió a l'Anella Científica és essencialment un servei que ens permet accedir a la informació i a la xarxa d'informació amb qualitat i rapidesa, així com una font de serveis addicionals que ens seran de gran utilitat”.**

La Fundació TecnoCampus Mataró-Maresme és l'organisme encarregat de gestionar el parc científic i de la innovació TecnoCampus Mataró-Maresme (TCM). El parc TCM, inaugurat recentment i amb seu a Mataró, engloba, entre altres entitats, tres centres universitaris: l'Escola Universitària Politècnica de Mataró (EUPMt), l'Escola Universitària del Maresme (EUM) i l'Escola Superior de Ciències de la Salut (ESCS), nascuda aquest mateix any. Creat amb vocació de ser un projecte nacional i internacional, el parc TCM és una aposta del territori per contribuir a la seva transformació econòmica i social.

La nova connexió contribuirà al desenvolupament del parc, tal com comenta el seu director en afirmar que “com a parc científic i de la innovació amb un fort vessant universitari, considerem que els serveis i recursos que ofereix l'Anella Científica són imprescindibles per obtenir i fomentar una bona connectivitat i relació amb la resta de centres que desenvolupen tasques de recerca”. Així, “amb la nova connexió esperem disposar d'un conjunt de recursos necessaris per a la nostra comunitat investigadora i universitària, principal beneficiària d'aquest servei, atesa la importància que té per a aquest col·lectiu poder disposar d'accés a banda ampla”, afegeix Uix i Güell.

La Fundació TCM s'ha connectat a l'Anella, tal com s'ha comentat, a una velocitat de 100 Mbps, “no obstant això i gràcies al fet que el sistema electrònic està preparat, es preveu que si en un futur les necessitats dels usuaris del parc TCM així ho requerissin, es pugui procedir a ampliacions de cabdal de fins a 1 Gbps”.

La missió de TecnoCampus és “actuar com a principal motor en l'àmbit ter-

ritorial per crear, captar, potenciar i retenir el talent necessari pel desenvolupament econòmic i social de l'entorn d'influència”, comenta Antoni Uix i Güell, “amb l'objectiu de configurar un parc científic i de la innovació amb transcendència universitària”. Les principals línies d'acció són: benestar i salut; turisme i oci; audiovisuals; electrònica, telemedicina i objectes intel·ligents.

**“Els recursos que ofereix l'Anella són imprescindibles per obtenir i fomentar una bona connectivitat i una relació amb la resta de centres que desenvolupen tasques de recerca”**

Entre les finalitats del TCM hi ha, comenta Uix i Güell, “d'una banda, establir i reforçar lligams entre el món universitari i la societat, en especial amb les institucions tecnològiques, científiques, de recerca i culturals, així com amb empreses; de l'altra, dur a terme les tasques pròpies d'un parc científic i d'innovació adreçades a la comunitat universitària, a les empreses, organismes, institucions i ciutadans en general”.

Per potenciar aquestes finalitats, la Fundació promou, finança i organitza cursos, seminaris, congressos i conferències; convoca i gestiona beques i atorga subvencions per a la recerca, el desenvolupament i la divulgació de temes diversos relacionats amb les seves àrees d'activitat.

El TCM ha estat fundat amb la premissa de créixer amb uns valors molt específics, tals com el treball en equip, el compromís i la solidaritat amb la societat i el territori, el manteniment d'una gestió econòmica sostenible, la creació d'un protocol de comunicació amb transparència i una projecció de futur amb esperit emprendedor. En aquest sentit, tal com destaca el director del TCM, “es treballa per un model universitari diferenciat, que passa per una atenció integral de l'estudiant, una formació professionalitzadora, i internacional que potencia l'esperit creatiu, l'emprenedor i les capacitats innovadores”.

TecnoCampus és membre de la Xarxa de Parcs Tecnològics de Catalunya, de l'Asociación de Parques Científicos y Tecnológicos de España i de la International Association of Science and Technology Parks, entre d'altres.



Imatge de les instal·lacions del parc TecnoCampus.



## Adamo s'incorpora al CATNIX

Adamo Telecom Iberia s'ha incorporat al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) amb un accés d'1 Gbps i un port d'1 Gbps al commutador a través de la ubicació de Telvent. Adamo és una empresa privada constituïda com a operadora de telecomunicacions, que té la seva seu a Barcelona

i proporciona serveis d'accés a internet a molt alta velocitat mitjançant xarxes FTTH (*Fiber To The Home*). Amb la incorporació d'Adamo, que va signar el conveni d'adhesió el passat 19 d'octubre, el CATNIX compta amb 24 membres entre operadors i proveïdors de serveis d'internet. ■



D'esquerra a dreta, Xavier Viladegut i Lars Fredrik Romanus, d'Adamo, i Jordi Bosch, secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació.

## Vint-i-quatre col·leccions i una institució més, a RECERCAT

L'Institut Català Internacional per la Pau de la Generalitat de Catalunya s'ha incorporat al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) amb tres col·leccions que inclouran els seus documents, informes i *working papers*. A més, durant el mes de novembre s'hi han afegit vint-i-una col·leccions més de disciplines diverses. En concret, la Universitat de Barcelona hi ha incor-

porat dues col·leccions; la Universitat Autònoma de Barcelona hi ha afegit també dues; la Universitat Oberta de Catalunya ha incorporat 15 col·leccions i l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentària (IRTA) ha afegit dues més. Amb aquestes darreres incorporacions RECERCAT disposa de 252 col·leccions de documents i 21 institucions participants. ■

## Les eleccions al Parlament, a PADICAT

El repositori Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) ha incorporat una nova col·lecció de documents que engloba sota el títol "Eleccions al Parlament de Catalunya 2010" recursos digitals relatius als comicis celebrats el passat 28 de novembre. Per crear aquest monogràfic, PADICAT ha capturat al voltant de 1.000 recursos d'internet ordenats de forma alfabètica i geogràfica. Entre ells hi ha pàgines web i blocs de 246 candidats, de par-

tits polítics amb i sense representació parlamentària, d'institucions i de 56 mitjans de comunicació.

A PADICAT, es confecciona des de 2006 una captura monogràfica per a totes les campanyes electorals a internet realitzades amb votants de Catalunya, entre els que hi ha les eleccions al Parlament l'any 2006, i les campanyes de les municipals concurregudes l'any 2007, les generals de 2008, i les europees de 2009. ■

## Més revistes i millores, a RACO

Durant el mes de novembre s'han incorporat al repositori Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) sis publicacions de la Universitat de Barcelona titulades *Anuari de l'Observatori de Biblioteques, Llibres i Lectura, Sylloge epigraphica Barcinonensis, Cercles: revista d'història cultural, Acta historica et archaeologica mediaevalia, Interactive educational multimedia i, Suhayl. International Journal for the History of the Exact and Natural Sciences in Islamic Civilization*. Amb aquestes darreres incorporacions, RACO disposa de 304 revistes en accés obert.



A més, ja es troben a RACO els articles a text complet publicats pel *Boletín de la Real Academia de Buenas Letras de Barcelona/Butlletí de l'Acadèmia de Bones Lletres de Barcelona* de la Reial Acadèmia de Bones Lletres des del primer número del 1902 fins a l'actualitat.

D'altra banda, també s'ha produït una millora al repositori. D'aquesta manera, s'ha inclòs un comptador de les revistes, articles i articles a text complet que conté. Aquest comptador s'actualitza a principis de cada mes i es troba situat en el marc de la dreta de la pàgina principal de RACO. ■



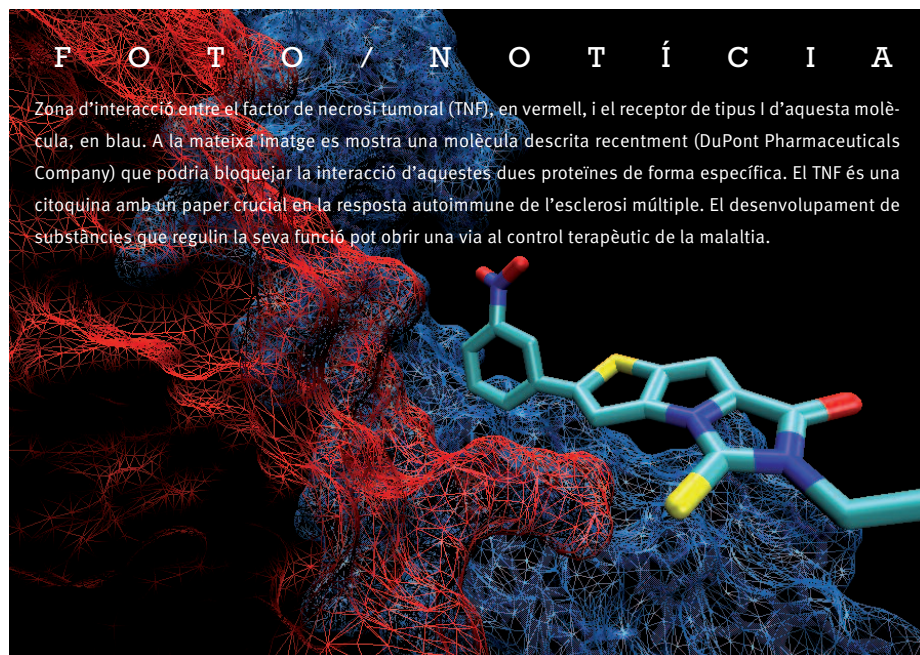
# Celebrat el curs "Eines i entorn de treball en el CESCA: nou Altix UV 1000"

JORDI PARETO



Després de l'adquisició de l'Altix UV 1000 s'ha celebrat a la fi de novembre, conjuntament amb Silicon Graphics, un curs sobre el funcionament del servei de supercomputació on s'han explicat també les ei-

nes i el servei d'atenció a l'usuari que es posa a l'abast de la comunitat científica per a facilitar-li la seva recerca. El curs també ha tractat les noves possibilitats de càlcul que ofereix el nou maquinari.



Zona d'interacció entre el factor de necrosi tumoral (TNF), en vermell, i el receptor de tipus I d'aquesta molècula, en blau. A la mateixa imatge es mostra una molècula descrita recentment (DuPont Pharmaceuticals Company) que podria bloquejar la interacció d'aquestes dues proteïnes de forma específica. El TNF és una citocina amb un paper crucial en la resposta autoimmunitària de l'esclerosi múltiple. El desenvolupament de substàncies que regulin la seva funció pot obrir una via al control terapèutic de la malaltia.

El grup de Neuroimmunologia Clínica del Centre d'Esclerosi Múltiple de Catalunya que treballa a l'Hospital Universitari Vall d'Hebron i que està dirigit pel Dr. Xavier Montalbán, es dedica des de fa molts anys a estudiar l'esclerosi múltiple, una malaltia neurodegenerativa i crònica que afecta greument la mobilitat de l'individu i que produeix una discapacitat progressiva. Aquesta malaltia constitueix el trastorn neurològic més freqüent entre els joves, després de l'epilèpsia. A més d'una intensa tasca en investigació clínica, el grup té en marxa diverses línies de recerca bàsica, dirigides pel Dr. Manel Comabella, amb tres objectius principals: trobar marcadors genètics que s'associïn a un major risc de patir la malaltia, estudiar els mecanismes patològics i buscar noves aproximacions terapèutiques. En els darrers mesos, s'ha iniciat una nova línia de recerca, dirigida pel Dr. Luis Agulló, que té com a objectiu analitzar la funció de proteïnes clau en el desenvolupament de la malaltia per mètodes computacionals. La utilització d'aquestes tècniques podria ajudar a entendre per què determinats polimorfismes o variacions en la seqüència d'algunes proteïnes predisposen al desenvolupament de la malaltia i, eventualment, permetre el disseny de fàrmacs que corregeixin el funcionament anòmal d'aquestes proteïnes.

Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA



Patrocina



talència

CATALUNYA 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

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

CESCA

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

Propostes d'articles

[teraflop@cesca.cat](mailto:teraflop@cesca.cat)

