



Memòria d'activitats de 2006

Fa 15 anys, el Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya es va crear per proporcionar exclusivament serveis de supercomputació a la comunitat científica. D'aleshores, hem vist com aquests serveis anaven creixent en diverses direccions per obrir-se a totes les institucions vinculades amb projectes R+D+i i que el nucli de l'activitat del CESCO ha esdevingut la gestió d'e-infraestructures de càlcul i de comunicacions.

Durant aquests 15 anys, el servei fundacional de supercomputació s'ha consolidat al voltant de tres grans àrees de recerca, la química teòrica, la modelització biomolecular i l'astrofísica, i s'ha ampliat amb el Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), que enguany ha celebrat el seu 10è aniversari; l'emmagatzematge de dades; els portals i les bases de dades universitàries; els dipòsits d'e-informació, el més antic dels quals, el de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), ha celebrat el seu cinquè aniversari; les comunicacions, centrades en la gestió de l'Anella Científica i el Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX); i la promoció per difondre els beneficis i el progrés d'aquests serveis.

Així doncs, l'ús d'aquestes infraestructures ha passat d'ésser exclusiu de l'àrea d'e-Ciència cap a altres, com ara e-Humanitats, e-Cultura, e-Salut... de manera que a través de la cooperació es rendibilitzin les inversions en el sistema universitari i de recerca. Amb aquest objectiu, el Consell de Govern ha ampliat el ventall d'institucions que es poden adherir a l'Anella Científica, ha establert una nova política de tarifes que garanteixen la cohesió territorial i ha acceptat la incorporació al Consorci del Departament de Salut i del Consell Superior d'Investigacions Científiques. Esperem que ambdues institucions ben aviat trauran profit dels diversos serveis que el CESCO ofereix.

Fruit d'aquest creixement i consolidació, hem signat un acord amb l'Ajuntament de Barcelona pel qual ens cedeix una parcel·la en el districte 22@ per construir-hi la nostra seu social, que continuarem compartint amb el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya, amb qui enguany farà 10 anys vam començar una col·laboració exitosa. La construcció d'aquesta seu social representa un repte engrescador que esperem finalitzar en els propers dos anys.

Les pàgines que segueixen mostren l'activitat desenvolupada durant el 2006. Enhorabona a tots els col·laboradors i especialment als consorciats i institucions adherides que l'han fet possible!



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

Rafael Español i Navarro
President del CESCO



Barcelona, 20 de febrer de 2007

Sumari

1. Introducció.....	3
2. Els òrgans de govern i els assessors	4
2.1. Els òrgans de govern	5
2.2. Els òrgans assessors	6
3. Els sistemes.....	7
3.1. La supercomputació	9
3.2. El disseny de fàrmacs	21
3.3. Els dipòsits d'e-informació	22
3.4. Els portals i bases de dades universitàries	34
3.5. Altres activitats en Sistemes	38
4. Les comunicacions.....	40
4.1. L'Anella Científica	41
4.2. Els serveis addicionals de l'Anella Científica	50
4.3. La connectivitat de RedIRIS	60
4.4. El Punt Neutre d'Internet a Catalunya	62
4.5. Altres activitats en Comunicacions	65
5. La promoció.....	67
5.1. La formació	67
5.2. La difusió	70
Annexos	
I. Els acrònims	75
II. Els òrgans de govern i els assessors	77
III. Els projectes de supercomputació de més consum	87
IV. Les publicacions realitzades pels projectes	97
V. Els investigadors externs	125
VI. Les tesis doctorals més consultades	133
VII. Les col·leccions al recerca	147
VIII. Les revistes a RACO	149
IX. Les institucions adherides a l'Anella Científica	153
X. Els servidors allotjats i hostatjats	157
XI. Les visites rebudes	159
XII. El sumari dels webs	161
XIII. Les portades del web	171
XIV. Les novetats del web	183
XV. La formació	187

1. Introducció

El Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya ha continuat centrant el seu treball en la gestió d'un gran complex de sistemes de càlcul i de comunicacions per donar servei a la universitat i a la recerca, basant-se en les tres àrees d'activitat consolidades al llarg dels seus 15 anys: els sistemes per a càlcul científic i per a informació universitària; les comunicacions, centrades en la gestió de l'Anella Científica i del CATNIX, i la promoció de l'ús i els beneficis d'aquestes tecnologies.



Figura 1. Els nostres serveis de 2006

La figura mostra els serveis oferts en aquestes tres àrees d'actuació. Per cadascun, s'indiquen en verd les altes produïdes en els nous serveis, com ara RACO, i el nombre de nous punts d'accés connectats a l'Anella Científica; en groc, els increments en nombre de participants en els serveis i el nombre de punts d'accés amb més cabal, i en vermell, les baixes.

En l'àrea de Sistemes, pel que fa als dipòsits d'e-informació, s'ha posat en marxa el de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO), amb 116 revistes. Al Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), el nombre d'universitats participants ha crescut fins a 15 amb la incorporació de la Universidade da Coruña, que, a més, ha col·laborat amb la traducció del portal al galleg. El Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) conté documents de 13 institucions, sis d'elles incorporades el 2006. En el Servei de Disseny de Fàrmacs, que ha demostrat l'èxit de la cooperació universitat-empresa en aquesta àrea, s'hi han incorporat dos nous grups de recerca (del CSIC i de la URV) i a la fi d'any s'ha donat de baixa Neuropharma.

En l'àrea de Comunicacions, l'Anella Científica ha incrementat en 11 el nombre de punts d'accés i, dels seus serveis addicionals, el Servei de Certificació Digital (SCD) ha crescut amb quatre institucions i el d'Eduroam, amb sis. Al CATNIX s'han registrat les baixes de dos ISP (Kaos Redes IP i KPG Communications). Pel que fa al Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors, s'han donat d'alta 12 servidors (del Consorci de Transferència de Tecnologia, de la Farga i del CBUC, entre d'altres) i tres han estat baixa.

En l'àrea de Promoció, s'han publicat cinc números de la revista *Teraflop* i s'han organitzat dues trobades: la desena edició de la Trobada de l'Anella Científica (TAC) i la setena edició de la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC).

Les seccions que segueixen a continuació descriuen l'estructura organitzativa del Consorci i les activitats desenvolupades en cadascuna de les seves tres àrees que gestiona: els Sistemes, les Comunicacions i la Promoció. A més, per completar la informació en aquestes tres àrees, s'inclouen 15 annexos. Els dos primers recullen un llistat d'acrònims per facilitar la lectura i els integrants dels diferents òrgans de govern i assessors, indicant les altes i les baixes produïdes. En Sistemes, s'esmenten els 30 projectes de supercomputació de més consum, les publicacions realitzades pels projectes i els investigadors externs al Consorci que han tingut accés als recursos de càlcul. També es relacionen les tesis doctorals més consultades al TDX, i les col·leccions i les revistes disponibles a RECERCAT i a RACO, respectivament.

En Comunicacions, es descriuen les institucions adherides a l'Anella Científica i la seva connectivitat, així com els servidors allotjats i hostatjats al Centre. Per últim, en Promoció, es detallen les visites rebudes al Centre, majoritàriament durant les jornades de portes obertes, s'inclou una còpia de les diferents portades del web, i es llisten les novetats i les activitats de formació publicades al web i els sumaris dels diferents webs que manté el Centre.

2. Els òrgans de govern i els assessors

Els òrgans de govern i els assessors del CESCA, descrits a les seccions següents, estan reflectits a la figura 2, amb l'any de creació i el nombre de reunions realitzades fins a la fi de 2006. A l'annex II s'inclou la relació detallada dels membres de cada comissió.

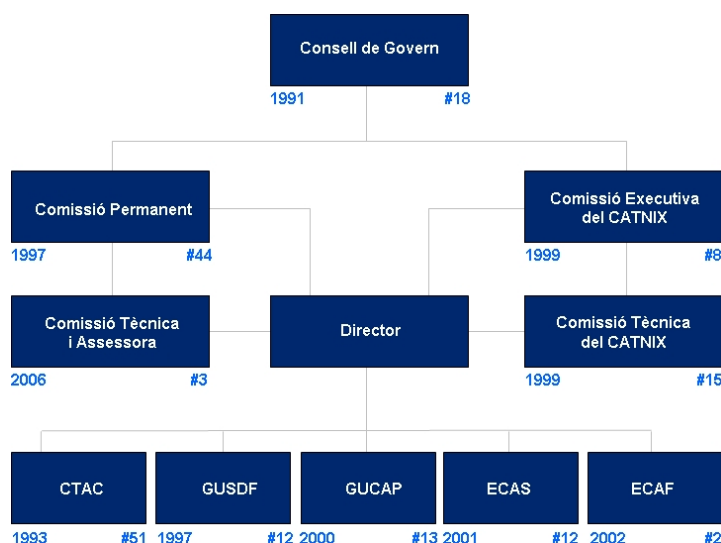


Figura 2. Els òrgans de govern i els assessors de 2006

2.1. Els òrgans de govern

El **Consell de Govern** s'ha reunit en dues ocasions, el 10 de maig i el 16 de novembre. En la primera reunió es van presentar i debatre les memòries d'activitats i econòmica de 2005, la proposta d'incorporació del Departament de Salut al Consell, i el pressupost i el pla de treball de 2006.

En aquesta reunió, el Consell va acceptar satisfactòriament la proposta del Departament de Salut per a la seva incorporació a aquest òrgan de govern, que ha permès aprofundir en l'ús de les e-infraestructures de recerca que es gestionen, especialment l'Anella Científica.

En la segona reunió, el Consell de Govern va aprovar la incorporació al Consorci del Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC), que des de la creació del Centre n'ha estat membre col·laborador, l'acceptació de la proposta de l'Ajuntament de Barcelona de cessió en ús d'un terreny situat al districte 22@ per ubicar-hi la seu social del Consorci, i el pressupost i el pla de treball per al 2007.

El Sr. Josep Huguet i Biosca, conseller d'Innovació, Universitats i Empresa, ha substituït el Dr. Joan Manuel del Pozo i Álvarez com a vicepresident del Consell de Govern en data 28 de novembre. A més, i a conseqüència de les diverses reestructuracions produïdes en el Govern de la Generalitat de Catalunya durant els mesos d'abril i maig, el Dr. del Pozo i Álvarez, conseller d'Educació i Universitats, va substituir el Dr. Manel Balcells i Díaz en data 11 de maig i el Sr. Balcells, conseller d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació, va substituir el Dr. Carles Solà i Ferrando en data 20 d'abril.

El Dr. Francesc Xavier Hernández i Cardona, director general de Recerca del Departament d'Innovació, Universitats i Empresa, ha substituït el Dr. Xavier Testar i Ymbert en la vocalia del Consell de Govern i en la presidència de la Comissió Permanent, en data 5 de desembre. El Dr. Hernández havia estat ja vocal fins al 30 de maig, quan va ser substituït pel Dr. Testar.

D'altra banda, el Dr. Josep Anton Ferré i Vidal, director general d'Universitats del Departament d'Innovació, Universitats i Empresa ha substituït el Dr. Ramon Vilaseca i Alavedra en data 2 de febrer.

El Sr. Jordi Bosch i Garcia, secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament de Governació i Administracions Públiques, ha substituït la Sra. Marta Contente i Gonzalo en la vocalia del Consell de Govern i en la presidència de la Comissió Executiva del CATNIX en data 30 de novembre. La Sra. Contente, secretària de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament de Presidència, havia substituït prèviament el Sr. Jordi Marín i Puigpelat en data 23 de maig. El Sr. Marín, secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació, havia reemplaçat el Sr. Oriol Ferran i Riera, en data 2 de maig.

En representació del Departament de Salut s'hi ha incorporat el Sr. Lluís Torrens i Mèlich en data 10 de maig, qui ha estat substituït pel Sr. Carles Arias i Casal en data 5 de desembre.

De la mateixa manera, s'han renovat les següents vocalies: El Dr. Antoni Giró i Roca, rector de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), ha substituït el Dr. Josep Ferrer i Llop, en data 29 de març, i el Dr. Francesc Xavier Grau i Vidal, rector de la Universitat Rovira i Virgili (URV) ha substituït el Dr. Lluís Arola i Ferrer, en data 23 de maig.

La **Comissió Permanent** s'ha reunit en 3 ocasions els dies 24 de febrer, 28 d'abril i 9 d'octubre per coordinar i fer el seguiment de les activitats desenvolupades, primer sota la presidència del Sr. Oriol Ferran i al final, sota la del Dr. Xavier Testar.

Les vocalies rotatòries de la Comissió Permanent han anat a càrrec del Dr. Marçal Pastor i Anglada, de la Universitat de Barcelona (UB); el Dr. Jordi Marquet i Cortés, de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB); el Dr. Carles Ramió i Matas, de la Universitat Pompeu Fabra (UPF); el Dr. Joaquim Majó i Fernández, de la Universitat de Girona (UdG) i, des del 23 de maig, el Dr. Josep Pallarès i Marzal, de la URV, en substitució del Dr. Antoni González i Sanmartí.

Pel que fa a la **Comissió Executiva del CATNIX**, el Sr. Jordi Martín i Guart ha substituït el Sr. Faustino Jiménez Carracedo com a representant d'Acens Technologies l'1 de gener, i el Sr. Félix Izquierdo García ha reemplaçat el Sr. Joan Dachs i Porta en representació d'Iporium Networks el 15 de febrer.

D'altra banda, l'11 de gener va causar baixa Flash10; el 9 de febrer, KPG Communications i el 29 de desembre, KAOS Redes IP.

2.2. Els òrgans assessors

La Comissió Tècnica i Assessora (**CTA**), constituïda enguany, s'ha reunit els dies 10 de febrer, 6 d'abril i 20 d'octubre per orientar als membres de la Comissió Permanent i al Director en la presa de decisions relatives als serveis del Centre.

Pel que fa a les vocalies d'aquesta Comissió, el Sr. Joan Hernández i Basora, de la UB, ha substituït el Sr. Jaume Arona i Corominas en data 13 de novembre i el Sr. Manuel Caballero de la Torre, de la UPC, ha causat baixa en data 9 de maig.

La Comissió Tècnica de l'Anella Científica (**CTAC**) s'ha reunit els dies 22 de març i 13 de desembre per fer el seguiment i debatre aquells temes que afecten l'Anella Científica. A aquesta comissió s'ha incorporat el Dr. Francesc Manaut i Clusella, del Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona, el 22 de març. A més, el Sr. Marc Guri i Casallachs ha substituït el Sr. Jordi Orgué i Bella com a representant del Departament d'Educació i Universitats en data 5 de setembre i el Sr. Manel Mendoza i Flores ha reemplaçat el Sr. Jordi Cebrià i Escolà en representació del Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya en data 12 de desembre.

El Grup d'Usuaris del Servei de Disseny de Fàrmacs (**GUSDF**) s'ha reunit el 7 de novembre per fer el seguiment i avaluació d'aquest servei. S'hi han incorporat la Dra. Nuria E. Campillo

Martín, de l'Institut de Química Médica del CSIC, el 15 de juny, i el Dr. Gerard Pujadas i Anguiano, del Departament de Bioquímica i Biotecnologia de la URV, el 26 de juny.

La Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (**GUCAP**) s'ha reunit en dues ocasions, el 5 d'abril i el 14 de desembre per fer balanç dels serveis de supercomputació rebuts. Enguany s'han renovat els membres d'aquesta comissió per a un període de quatre anys. Els Drs. Josep M. Lluch i Jordi Torra, del Departament de Química de la UAB i del Departament d'Astronomia i Meteorologia de la UB, respectivament, han substituït el Dr. Santiago Olivella en la vicepresidència de la comissió. Arrel de l'esmentada renovació, han causat baixa de les vocalies els Drs. Santiago Álvarez, Ildefonso Cuesta, Antonio González, Emili Hernández, Baldomero Oliva, Modesto Orozco i Leonardo Pardo, i s'hi han incorporat els Drs. Francisco J. Luque, Eliseo Ruiz, Carles Alemán, Anna Serra, Carles Jaime, Carlos Frontera, Lourdes Vega, Enrique Gaztañaga i Feliu Maseras.

La Comissió Tècnica del CATNIX (**PN/T**) s'ha reunit els dies 6 de juliol i 15 de desembre per analitzar i debatre els temes que afecten el funcionament del punt neutre. El 15 de febrer, el Sr. José Vidaña i Moyano ha estat reemplaçat pel Sr. Félix Izquierdo García, en representació d'Iporium Networks. L'11 de gener es va donar de baixa Flash10; el 9 de febrer ho va fer KPG Communications i el 29 de desembre, KAOS Redes IP.

La comissió d'Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Supercomputació (**ECAS**) s'ha reunit el 5 d'abril per acordar la renovació de l'equipament de supercomputació i adjudicar les hores computacionals a càrrec del Ministerio de Educación y Ciencia (MEC). S'han incorporat a aquesta comissió els Drs. Jordi Torra i Roca i Francisco Javier Luque Garriga i ha causat baixa el Dr. Santiago Olivella.

La comissió d'Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Disseny de Fàrmacs (**ECAF**) actua com a mesa de contractació per als concursos que es realitzen en maquinari o programari per aquest servei i, en general, com a equip d'especialistes que treballen plegats per desenvolupar idees sobre aquest tema i per proposar plans d'acció al respecte.

3. Els sistemes

L'objecte fundacional del CESCA va ésser “gestionar un gran complex de sistemes de càlcul” i, per tant, la supercomputació ha estat sempre present en els nostres serveis a la universitat i la recerca, primer en equips vectorials i avui dia en superescalars, tant de memòria compartida com de distribuïda, per trobar nous materials, avançar en el tractament de les malalties, reduir l'impacte de l'ésser humà en el medi ambient o aprofundir en l'estudi de les nostres galàxies. Aquesta àrea s'ha anat ampliant amb d'altres serveis: el disseny de fàrmacs, l'emmagatzematge de dades, els dipòsits d'e-informació, i els portals i bases de dades universitàries.

L'any 1996 es va posar en marxa el Servei de Cerca de Farmacòfors, en col·laboració amb alguns laboratoris farmacèutics, per facilitar la cerca de farmacòfors en bases de dades de compostos d'interès biològic. L'èxit d'aquest servei ha impulsat la incorporació de noves eines derivades de la química computacional que s'apliquen per predir, guiar i crear models de les molècules, les seves propietats i les seves interaccions, permetent així un disseny basat en el coneixement. En l'any del seu desè aniversari, ha passat a denominar-se Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF).

El Servei d'Emmagatzematge de Dades (SED) va entrar en operació l'any 1999 per facilitar inicialment als investigadors l'arxiu dels resultats dels seus càlculs en una llibreria automatitzada. Avui dia, aquest servei és també usat per totes les àrees d'activitat del CESCA i fins i tot per preservar les dades internes.

L'any 1999, com a fruit del llavors *Pla Estratègic Catalunya en Xarxa*, es va engegar conjuntament amb el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) el disseny d'un dipòsit col·lectiu per emmagatzemar, en format digital, el text complet de totes les tesis doctorals llegides a les universitats de Catalunya i difondre-les arreu del món, a través d'accés obert, és a dir, de l'accés lliure i gratuït per la xarxa, preservant els drets de propietat intel·lectual dels autors.

Aquest servei, anomenat Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), va iniciar-se l'any 2001 i s'ha ampliat amb tres de nous: el Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT), el de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) i el Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT). El primer és un dipòsit cooperatiu de documents digitals que inclou la literatura de recerca de les universitats i dels centres d'investigació de Catalunya. El segon dipòsit difon en accés obert revistes científiques, culturals i erudites catalanes, i compta també amb la col·laboració de la Biblioteca de Catalunya (BC). El tercer, liderat per la BC, és un dipòsit destinat a recollir i preservar tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital.

A més, des de l'any 2000, el CESCA hostatja portals i bases de dades, universitàries o relacionades amb la Societat de la Informació, de les institucions consorciades i de les adherides a l'Anella Científica, per tal que el seu accés sigui més eficient i segur. El ventall de serveis que ofereixen és ben ampli: gestions i informació acadèmica, continguts digitals de caire històric, difusió de l'ús de les TIC, etc.

En la taula següent es mostra l'evolució de diferents indicadors de Sistemes des de l'any 2002:

Indicadors de Sistemes	2002	2003	2004	2005	2006
Supercomputació					
Rendiment punta (Gflop/s)	134,16	170,96	690,96	1.045,95	1.521,79
Nombre de projectes	84	77	77	58	68
Hores computacionals (HC)	646.780	687.997	735.840	1.045.073	1.144.303
% HC executades en Gaussian	71%	59%	74%	n/d	n/d
Treballs en espera < 1 hora ¹	64%	61%	23%	24%	32%
Treballs en espera > 24 hores ¹	12%	16%	35%	28%	29%
Visites programes de mobilitat ²	51	45	25	30	16
Dipòsits d'e-informació					
Institucions participants al TDX	10	11	12	14	15
Tesis doctorals disponibles	783	1.341	2.142	3.025	4.014
Consultes realitzades (en milers)	63,56	278,71	1.184,75	2.211,96	3.543,64
Institucions (col·leccions) a RECERCAT				7 (16)	13 (36)
Documents consultables				1.161	3.109
Institucions ed. (revistes) a RACO					24 (116)
Números de revista incorporats					2.113
Articles incorporats					29.610
Webs (captures) a PADICAT					110 (646)
Fitxers incorporats, en milions (GB)					3,69 (167)
Altres serveis					
SDF: Empreses+grups de recerca	3+9	5+9	4+9	6+8	5+10
SED: Terabytes (TB) emmagatzemats	4,25	5,96	8,06	9,11	12,38
Consultes ³	759	716	807	791	1.808

¹A partir de 2004, no es comptabilitzen els treballs en espera *short*.

²A partir de 2005, només visitants al CESCA.

³A partir de 2006, s'han incorporat les de dipòsits i portals que no es comptabilitzaven abans.

Les seccions que segueixen descriuen aquests serveis.

3.1. La supercomputació

La supercomputació permet als investigadors realitzar càlculs de gran envergadura que fan millorar la seva recerca per trobar nous materials, avançar en el tractament de les malalties, reduir l'impacte de l'ésser humà en el medi ambient o aprofundir en l'estudi de les nostres galàxies.

El 2006, el Dr. Santiago Álvarez, de la UB, ha estat nomenat acadèmic de la Real Academia de Ciencias, en la secció de Físico-Química. El Dr. Álvarez és cap del projecte *Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics*, el cinquè de més consum al Centre (6%), en el qual, entre altres línies de recerca, estudien les propietats magnètiques de compostos amb aplicacions per crear memòries magnètiques o imants a escala nanoscòpica.

El projecte de més consum per segon any consecutiu ha estat el liderat per Mariona Sodupe, de la UAB, *Catàlisi per metalls de transició. Aplicacions en química ambiental i en sistemes d'interès bioquímic*, que ha usat un 17% del total d'hores computacionals consumides l'any 2006. El segon projecte ha estat el de Modesto Orozco, *Reconeixement molecular*, amb un 7%, mentre que el tercer, *Estructura i propietats dels polímers: càlculs electrònics, simulacions atomístiques i models coarse-grained*, és de Carlos Alemán, de la UPC, amb un 7% també.

Si bé la majoria de projectes continuen sent de l'àrea de la química teòrica, destaca l'increment de projectes de l'àrea de la física entre els 30 de més consum. A més del projecte de Jordi Torra, *GALA, el cens de la nostra galàxia*, que continua d'anys anteriors, també hi apareixen els projectes d'Enrique Gaztañaga, *Estructura a gran escala de l'Univers*, i de Blai Sanahuja, *Transport de partícules en el camp magnètic interplanetari (turbulent-divergent)*.

3.1.1. El maquinari

El CESCA disposa dels següents servidors de càlcul, en ordre cronològic d'adquisició: Compaq AlphaServer HPC320, amb 32 processadors EV68 i una memòria de 28 GB; Compaq beowulf DS10 amb 8 EV67 i 4 GB; AlphaServer GS1280 d'HP amb 16 EV7 i 32 GB; HP rx2600 amb 2 Itanium2 i 2 GB; SGI Altix 3700 Bx2, amb 128 Itanium2 i 384 GB, i CP4000 amb 66 AMD64 Opteron 275 de doble nucli i 528 GB.

El 2006 s'han aturat dues màquines HP. L'una, el V2500 (*puigcerver*), al març, i l'altra, l'N4000 (*pastuira*), al desembre. *Puigcerver*, instal·lat el 1998, va ser actualitzat el 1999 de 16 processadors PA8200 a PA8500, com *pastuira*. Això va possibilitar que el seu rendiment punta passés de 15,36 a 28,16 Gflop/s, mentre que el rendiment màxim passava de 10,65 a 17,47 Gflop/s. Aquesta màquina ha proporcionat 895.414 hores de càlcul.

Pastuira, instal·lat el 1999, comptava amb 8 processadors PA8500 a 440 MHz, 4 GB de memòria principal i 227 GB en disc. El seu rendiment punta era de 14,08 Gflop/s i el rendiment màxim de 10,22 Gflop/s. Amb la meitat de processadors que *puigcerver*, aquest supercomputador ha proporcionat 472.935 hores de càlcul.

Puigcerver i *pastuira* s'han fet servir, majoritàriament, per dur a terme diversos projectes acadèmics d'investigació i també privats. Així, membres de la Divisió Telecom de l'empresa multinacional Sema Group van provar en aquests servidors el rendiment d'una nova aplicació desenvolupada per a operadors de telefonia.



Figura 3. L'evolució del maquinari de supercomputació (1993-2006)

El 7 de març, aprofitant la celebració del 15è aniversari del Centre, es va inaugurar la e-infraestructura de càlcul i d'emmagatzematge, que està integrada per dos clústers Linux, un de càlcul i un altre d'e-informació, i una llibreria automatitzada per a l'emmagatzematge de dades.

El clúster de càlcul HP CP4000, inicialment amb 16 nodes ProLiant DL145 G2 i 256 GB de memòria, va ser ampliat a l'octubre amb 17 nodes més, arribant a un total de 33 nodes, 66 processadors i 528 gigabytes (GB) de memòria. Al juliol, també es va ampliar l'SGI Altix de 96 a 128 processadors i de 288 a 384 GB de memòria. Amb la posada en marxa del CP4000 i l'ampliació de l'Altix, el rendiment punta del Centre ha arribat a 1.508 gigaflops (Gflop/s).

SGI Altix 3700 Bx2 ⁰⁴⁻⁰⁷

- 128 Itanium2 (1,6 GHz, 16 KB, 0,256 MB, 6 MB)
- 384 GB, 5,99 TB, 819,20 Gflop/s

HP CP4000 ⁰⁷⁻⁰³ ⁷⁻¹²

- 132 Opteron 275 DC (2,2 GHz, 256 KB, 2 MB)
- 528 GB, 9,41 TB, 580,80 Gflop/s

CPQ AlphaServer HPC320

- 32 EV68 (833 MHz, 64 KB, 8 MB) [8 ES40]
- Memory Channel II (100 MB/s)
- 28 GB, 892 GB, 53,31 Gflop/s

HP AlphaServer GS1280

- 16 EV7 (1.150 MHz, 64 KB, 1 MB)
- 32 GB, 655 GB, 36,80 Gflop/s

HP N4000 ²⁹⁻¹²

- 8 PA-8500 (440 MHz, 1 MB)
- 4 GB, 227 GB, 14,08 Gflop/s

CPQ beowulf

- 8 EV67 (600 MHz, 64 KB, 2 MB) [8 DS10]
- Myrinet (2 Gbps)
- 4 GB, 291 GB, 9,60 Gflop/s

HP rx2600

- 2 Itanium2 (1,000 MHz, 32KB, 256 KB, 3 MB)
- 2 GB, 146 GB, 8,00 Gflop/s

Figura 4. El maquinari disponible durant el 2006

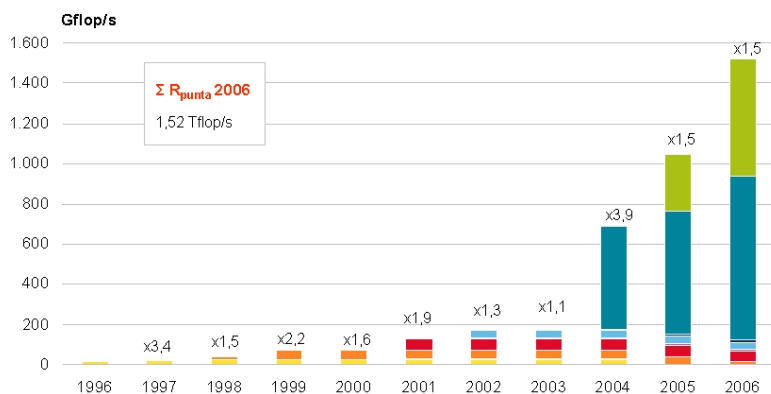


Figura 5. El maquinari disponible: una visió històrica

Les característiques tècniques dels diferents processadors disponibles són les següents:

	N4000 8500	beowulf EV68	HPC320 EV68	GS1280 EV7	rx2600 Itanium2	Altix 3700 Itanium2	DL145 Opt.275
Freqüència (MHz)	440	600	833	1.150	1.000	1.600	2.200
Amplada bus	64	64	64	128	128	128	128
Cau (L1 KB/L2 MB/L3 MB)	1.024/-/-	64/2/-	64/8/-	64/1,75/-	32/0,25/3	16/0,256/6	128/2/-
R _{punta} (Gflop/s)	1,76	1,20	1,67	2,30	4,00	6,40	8,80
LINPACK TPP	1.290	878	1.277	1.900	3.530	5.937	7.153
LINPACK 100x100	375	471	639	950	1.102	1.765	1.598
SPECint95/2000	34,0/-	34,4/355	50,0/565	-/900	-/-	-/1.441	-/1.515
SPECfp95/2000	51,4/-	54,6/400	100,0/77	-/1.450	-/1.427	-/2.647	-/1.830
CESCA/QT	3,31*	3,44**	6,54**	9,10**	10,44**	17,70***	16,64***
CESCA/MM	n/d	1,04	1,64	2,37	n/d	3,84	2,91
CESCA/B	n/d	2,82	5,19	7,27	8,16	13,72	11,18

En cursiva, nombres estimats.

Els resultats de QT són per a Gaussian98 A.11*, Gaussian03 B.02** i C.02***.

Pel que fa a emmagatzematge, la nova llibreria de cintes ADIC Scalar i2000, amb una capacitat de 34 terabytes (TB), ha substituït l'StorageTek Timberwolf 9740, de l'any 1999. Així, la capacitat d'emmagatzematge en el robot s'ha multiplicat per sis. A més, al setembre es va ampliar el subsistema de discos Enterprise Virtual Array V.2 (EVA) amb una nova safata i 30 discos de 146 GB, de manera que la seva capacitat és de 14,47 TB. També es disposa d'un subsistema de discos StorageWorks MA6000, amb 985 GB disponibles.

- ADIC Scalar i2000** ⁷⁻⁰³
 - 2 transports LTO-3 (80 MB/s)
 - 300 cel·les (100 habilitades)
 - 85 cintes (x 400 GB = 34 TB)
- StorageTek TimberWolf 9740** ¹⁴⁻¹²
 - 2 transports 9840 (10 MB/s)
 - 302 cintes (x 20 GB = 5,9 TB)
- Servidor de còpies** ¹⁴⁻¹²
 - Fujitsu PRIMERGY RX200S2
 - Veritas Netbackup 5.0



- HP EVA V.2 2C6D-B** ¹⁴⁻⁰⁹
 - FC 14,47 TB
 - 2 FC 2 Gbps HSV110

- Servidor de fitxers**
 - HP DS25: 2 x EV68, 1 GHz, 4GB, 72 GB
 - HP DS20: 2 x EV68, 833 MHz, 4GB, 72 GB

Figura 6. El maquinari d'emmagatzematge de dades

De les sis Grans Instal·lacions en Supercomputació, seleccionades per la Comissió Europea per ser utilitzades per investigadors europeus a càrrec de diversos programes de mobilitat (HCM, PECO, TMR, IHP i HPC), quatre apareixen a la llista TOP500 dels 500 supercomputadors més potents del món. A la cinquena posició de la classificació general, i com a primer supercomputador d'Europa, destaca l'IBM eServer BladeCenter JS20 del Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS) amb 10.240 processadors.

L'EPCC anglès se situa a la posició 43 amb l'IBM eServer pSeries p5 de 2.560 processadors, seguit del CINECA, a la 44, amb també un IBM eServer 326 Cluster de 5.120 processadors. Aquest centre italià té tres màquines més a la llista, a les posicions 340, 347 i 433. L'HLRS alemany se situa a la posició 72 amb un NEC SX8 de 576 processadors.

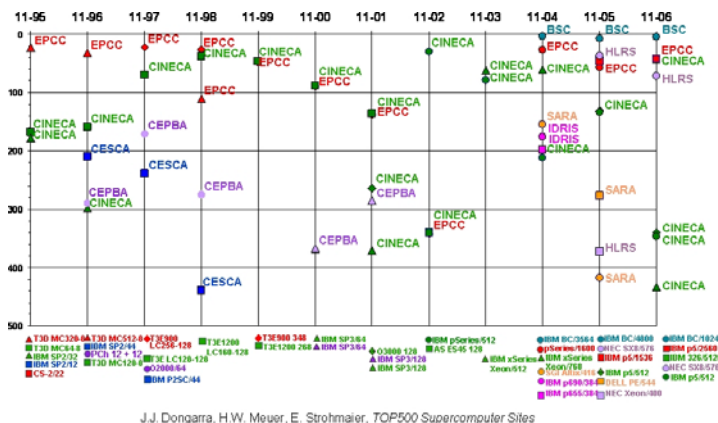
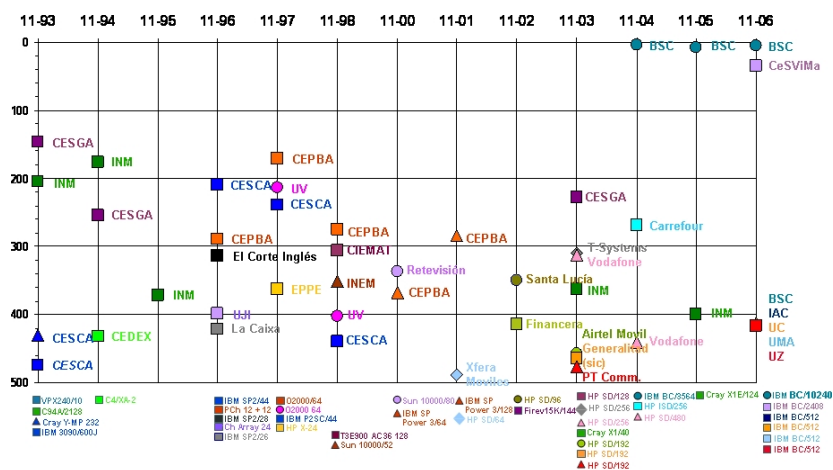


Figura 7. Grans Instal·lacions de Supercomputació

MareNostrum no ha estat l'únic sistema de l'Estat present a les 10 primeres posicions europees, l'IBM BladeCenter JS20 Cluster del Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMA) amb 2.408 processadors del MareNostrum original ha entrat en novè lloc al rànquing europeu i en 34a posició a la llista, amb una capacitat de càlcul de 21,19 Tflop/s.

A més, cinc sistemes eServer BladeCenter JS20 corresponents al BSC-CNS, a l'Institut de Astrofísica de Canarias (IAC), a la Universidad de Cantabria, a la de Màlaga i a la de Zaragoza han entrat a les posicions 412, 413, 415, 416 i 417, respectivament. Aquests supercomputadors de 512 processadors que també provenen del MareNostrum i que tenen una capacitat de càlcul de 45,05 Tflo/s cadascun conformen, junt amb el del CeSViMA, l'anomenada Red Española de Supercomputación que compta amb el suport del Ministerio de Educación y Ciencia i que consisteix en una estructura distribuïda de supercomputadors per donar suport a les necessitats de càlcul dels diferents grups de recerca espanyols.



J.J. Dongarra, H.W. Meuer, E. Strohmaier, *TOP500 Supercomputer Sites*

Figura 8. Centres de l'Estat a la llista TOP500

3.1.2. El programari

El CESCA disposa d'un programari de supercomputació molt especialitzat, tant en programari de base com en aplicacions, per tal que els usuaris puguin obtenir el màxim rendiment del maquinari i puguin satisfer les seves necessitats de càlcul. El programari de base és majoritàriament homogeni per a totes les màquines i està constituït pels diferents compiladors, les llibreries de càlcul numèric, les de paral·lelització i els gestors de cues de *batch*.

Hi ha 40 aplicacions disponibles, de les quals s'han instal·lat enguany set de noves: les llibreries matemàtiques GSL, AMD ScaLAPACK i HDF5, el programari Gauss, un llenguatge de programació matricial àmpliament utilitzat per científics, estadístics, biòmetres, econometristes i analistes financers; GADGET2, per realitzar simulacions cosmològiques, i DL_POLY, un paquet de simulació de dinàmica molecular. També s'ha instal·lat el nou programari Sybyl i un nou mòdul de Catalyst, HypoRefine, per al Servei de Disseny de Fàrmacs, que seran descrits a la secció 3.2.

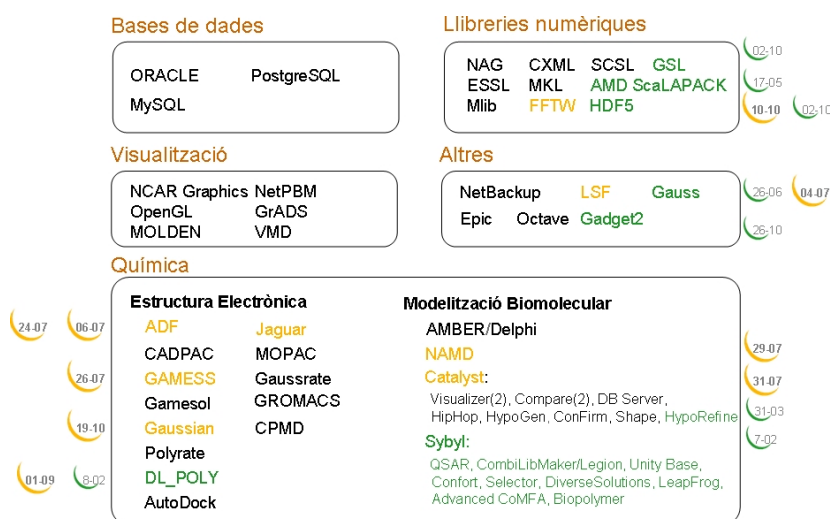


Figura 9. El programari disponible

A totes les màquines s'ha instal·lat la nova versió de Gaussian 03, revisió D.02. Gaussian és un programa d'estructura electrònica que permet calcular les energies, estructures moleculars i freqüències vibracionals de sistemes moleculars i diverses propietats moleculars que se'n deriven. Es pot utilitzar per estudiar molècules i reaccions sota un ampli ventall de condicions, tant d'espècies estables com de compostos difícils o impossibles d'observar experimentalment.

A les màquines Altix, GS1280 i HPC320 s'ha actualitzat DL_POLY_2 a la versió 2.15. L'Altix també disposa de la nova aplicació DL_POLY_3. DL_POLY és un paquet de simulació de dinàmica molecular de propòsit general.

Al CP4000 i a l'Altix s'ha instal·lat la nova versió de juny de 2005 del programa de química quàntica GAMESS, tant en la versió seqüencial com en la paral·lela. També s'hi ha instal·lat el programa NAMD versió 2.6b1, un codi paral·lel de dinàmica molecular dissenyat per a simulacions d'altres prestacions de grans sistemes biomoleculars.

En aquestes dues màquines s'ha actualitzat GROMACS a la versió 3.3.1, un programa de simulació de dinàmica molecular, dissenyat principalment per a molècules bioquímiques com ara les proteïnes i lípids, que impliquen una gran quantitat d'interaccions i enllaços complexos. La seva rapidesa de càlcul ha fet que molts grups l'utilitzin també per a recerca en sistemes no biològics, com ara polímers.

En aquestes màquines també s'hi ha instal·lat Jaguar, en la seva versió 6.5, amb una llicència flotant que permet la seva execució tant al CP4000 com a l'Altix. Jaguar és un paquet *ab-initio* d'altres prestacions usat per fer simulacions en fase gas i en dissolució, i és particularment ràpid en sistemes que contenen àtoms metàl·lics.

També s'hi ha actualitzat el programari ADF a la versió 2006.01, per a la qual es disposa dels binaris corresponents. ADF és un programa mecano-quàntic per sistemes poliatòmics que implementa la teoria del funcional de la densitat (DFT).

Al CP4000 s'ha instal·lat l'aplicació GAUSS 7.0, junt amb el mòdul Maximum Likelihood, en la seva versió 5.0. GAUSS és un llenguatge de programació matricial àmpliament utilitzat per científics, enginyers, estadístics, biòmetres, econometristes i analistes financers. A més, és un entorn complet d'anàlisi, adient tant per a la realització de càlculs ràpids com per a anàlisis complexes de milions de dades.

S'han instal·lat a l'HP CP4000 les llibreries matemàtiques AMD ScaLAPACK versió 3.1.0 i FFTW versió 3.1.1. AMD ScaLAPACK és una extensió de les llibreries ACML (AMD Core Math Library), dirigida a la resolució de càlculs d'àlgebra lineal en un entorn de computació paral·lela amb memòria distribuïda. FFTW és una col·lecció de rutines C pensades per calcular transformades discretes de Fourier en una o més dimensions, tant per a dades reals com complexes.

S'han instal·lat a l'Altix les llibreries GSL, que proveeixen un ampli ventall de rutines matemàtiques, i les HDF5, que són llibreries de propòsit general i a la vegada un format de fitxers per a l'emmagatzematge de dades científiques.

S'ha instal·lat a l'Altix la versió 2.0.3 de GADGET2, un codi optimitzat per realitzar simulacions cosmològiques en supercomputadors paral·lels. GADGET permet estudiar diversos problemes astrofísics, com ara les col·lisions de galàxies o la formació d'estructures complexes a l'Univers.

3.1.3. El servei de càlcul

Les hores computacionals (HC) usades al maquinari del CESCA per 68 grups de recerca han estat 1.144.303, un 9% més sobre les 1.045.073 de 2005. La química teòrica continua essent l'àrea que més recursos consumeix (72%), seguida de la modelització biomolecular (12%) i la física (12%). Per institució, la UB (33%), la UAB (30%) i la UPC (9%) han usat quasi tres quartes parts dels recursos. L'annex III descriu els 30 projectes de més consum d'enguany.

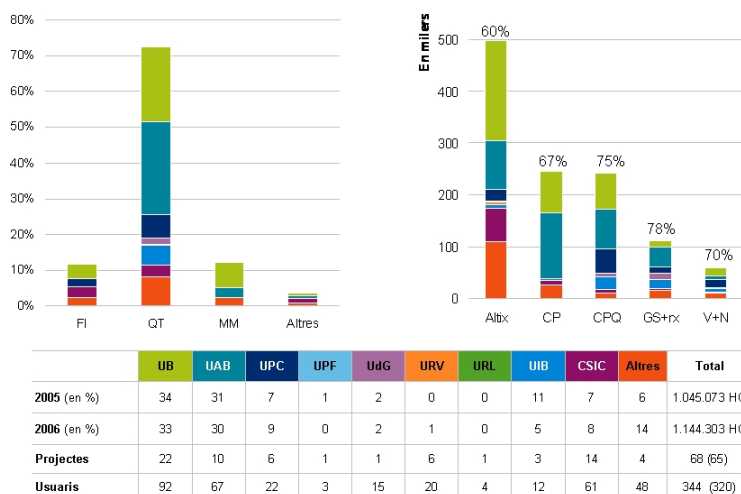


Figura 10. El consum per institució

El maquinari més utilitzat ha estat l'Altix (43%), el CP4000 (21%) i l'HPC320 (21%), que han tingut una ocupació del 60%, 67% i 75%, respectivament. La mitjana de la càrrega del maquinari ha estat força elevat, d'un 70%.

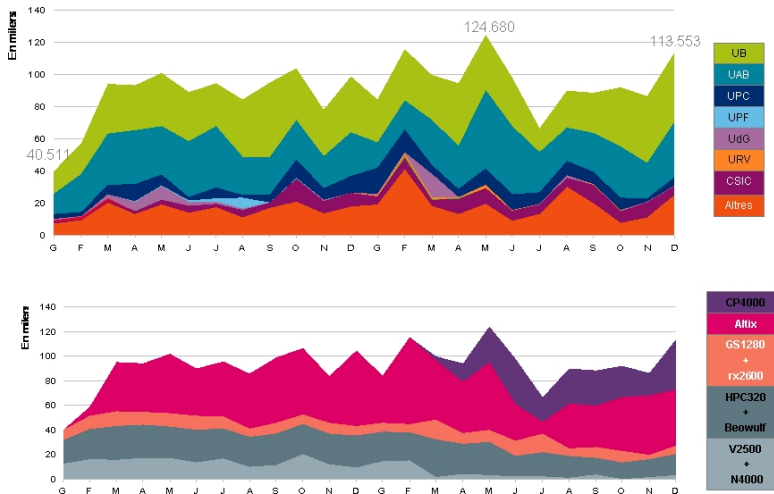


Figura 11. El consum mensual per màquina i per institució

L'ús temporal continua essent irregular entre les diverses institucions, la qual cosa corrobora un any més el benefici de la compartició d'aquests recursos de ràpida obsolescència tecnològica. El mes de menys consum va ser juliol (66.735 HC), mentre que el maig va ésser el de més consum (124.680 HC).

El nombre de treballs executats ha augmentat un 9%, passant de 21.893 a 23.970. D'aquests treballs, un 32% s'han iniciat abans d'una hora d'espera i un 29% han hagut d'esperar més de 24 hores, mentre que el 2005 els percentatges eren 24% i 28%, respectivament. Tot i que la potència de càlcul del Centre ha crescut, en mitjana, el temps d'espera per cua en dies s'ha mantingut, ja que ha estat d'1,45 dies mentre que l'any 2005 va ser d'1,42. Aquest fet és conseqüència de l'augment de la demanda dels recursos.

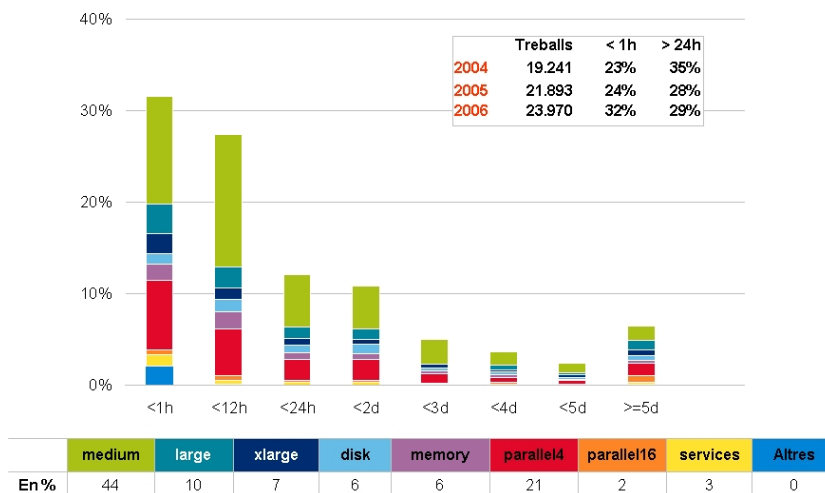


Figura 12. El temps d'espera per cua

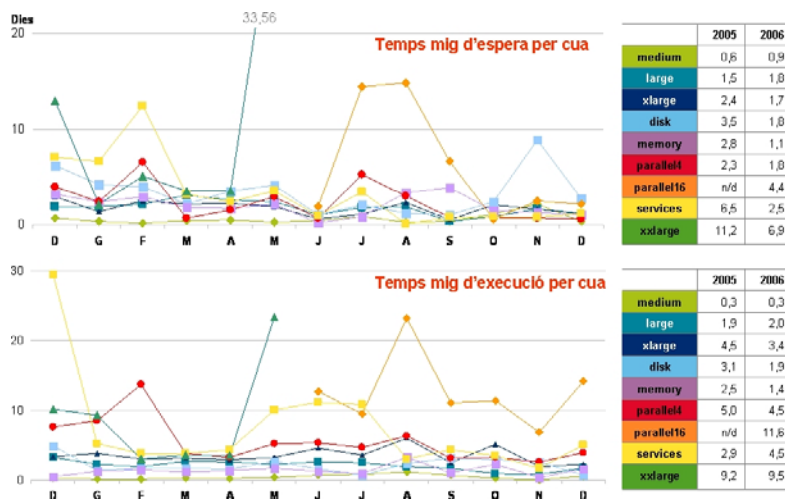


Figura 13. Temps mitjà d'espera i d'execució

Per donar resposta a la creixent demanda de treballs paral·lels i amb més necessitat de recursos de memòria i disc, s'han reestructurat les cues de *batch*. Els principals canvis que s'han fet són els següents: creació de dues cues paral·leles (*parallel4* i *parallel16*) per tal de millorar la gestió dels treballs paral·lels així com el seu temps d'espera, augment dels límits de les cues seqüencials de CPU, *medium*, *large* i *xlarge*, fusió de les cues *ldisk* i *xdisk* en una sola cua (*disk*) amb límits més alts, fusió de les cues *lmem* i *xmem* en una sola cua (*memory*) amb límits més alts, i modificació de la cua *services* perquè accepti tant treballs seqüencials com paral·lels amb grans requisits de recursos.

Gràcies a aquesta reestructuració, el nombre de treballs paral·lels s'ha incrementat d'un 19% a un 24% i el nombre d'hores consumides per aquests treballs ha representat un 58%, un 11% més que l'any 2005. De la mateixa manera, el nombre de treballs que necessiten més de 5 GB de memòria ha crescut, d'un 2 a un 4%, i les hores que han usat aquests treballs ha representat un 15% del total d'hores consumides, un 5% més que l'any anterior. En el projecte amb més requisits de memòria, del Dr. Gaztañaga (figura 14), s'han executat simulacions usant vuit processadors i de l'ordre de 130 GB de memòria.

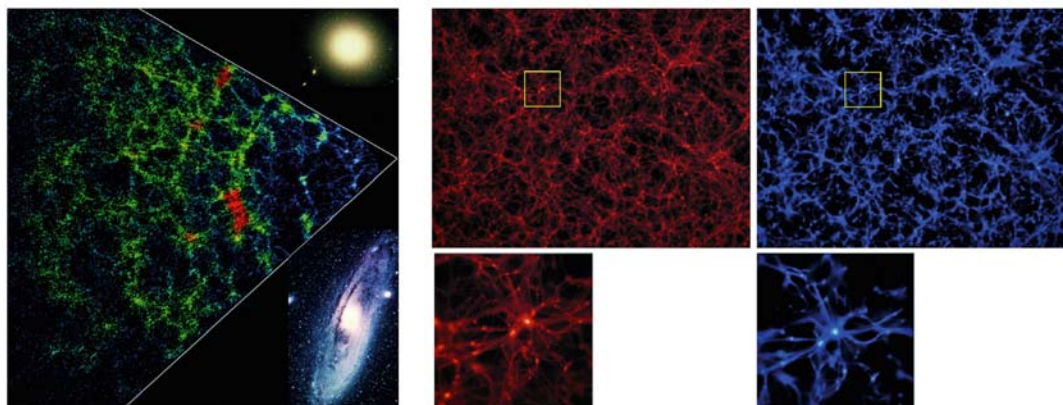


Figura 14. Estructura a gran escala de l'Univers

Tant els canvis realitzats en les cues com la instal·lació i ampliació de maquinari han afavorit la reducció del temps mig d'espera de les cues de més recursos de memòria, disc i treball paral·lel. Concretament, les cues *disk*, *memory* i *services* han disminuït el seu temps d'espera al voltant d'un 50%, mentre que la *parallel4* ho ha fet en un 22%.

Pel que fa al temps d'execució, la majoria de cues s'han mantingut en valors similars als de l'any anterior, excepte per a les cues *xlarge*, *memory* i *parallel4*, que han reduït el temps d'execució, en incrementar-se el nombre de cues de grans recursos disponibles. Per contra, la *services* ha incrementat el temps d'execució, ja que l'existència de més recursos ha permès que els usuaris abordessin simulacions més complexes.

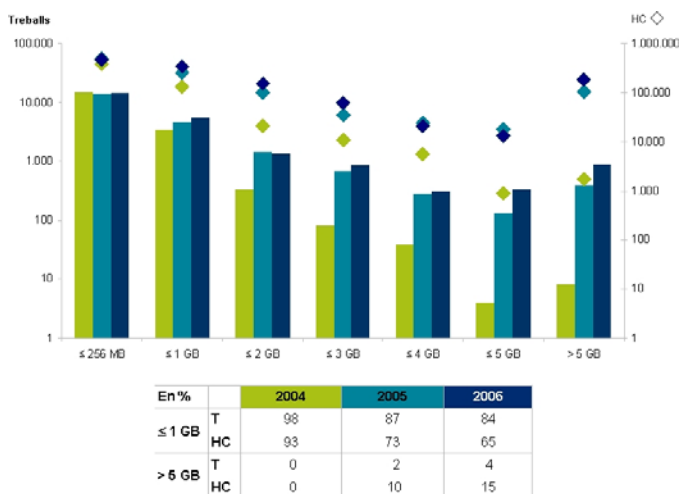


Figura 15. Ús de recursos: memòria real

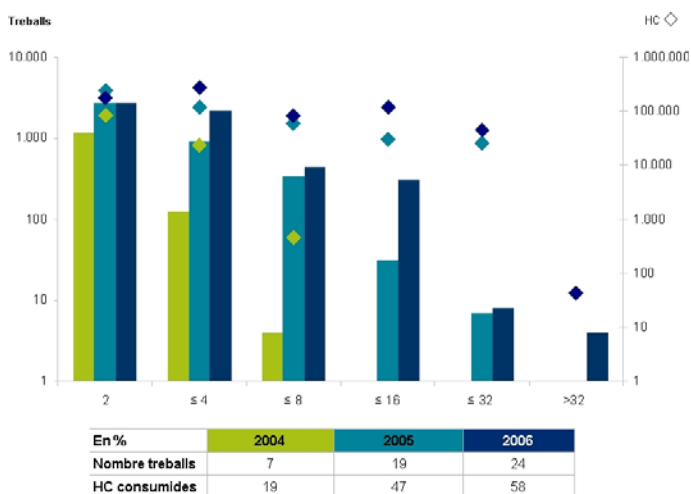
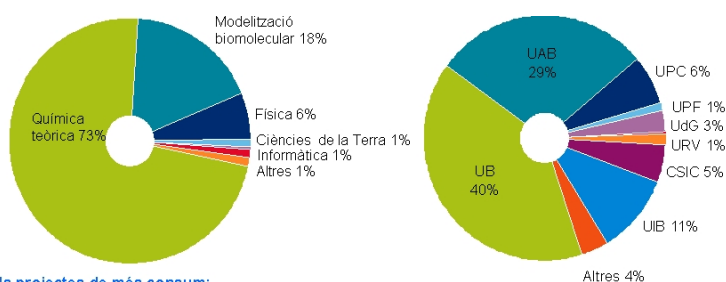


Figura 16. Ús de recursos: treball paral·lel

De les hores computacionals usades en el període 1996-2006, un 73% ha estat en l'àrea de química teòrica, un 18% en la de modelització biomolecular, un 6% en la de física, i un 3% en altres àrees. Dues universitats han usat dos terços dels recursos: UB (40%) i UAB (29%).



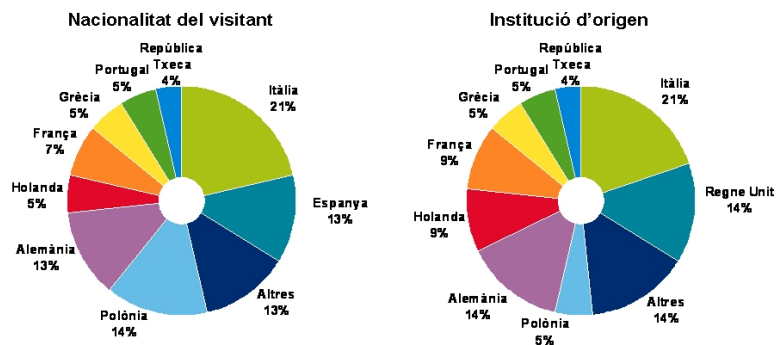
Els projectes de més consum:

• M. Sodupe (UAB): <i>Catàlisi per metalls de transició: Aplicacions en Química Ambiental i en sistemes d'interès...</i>	11,9%
• S. Álvarez (UB): <i>Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics</i>	9,3%
• M. Orozco (UB): <i>Reconeixement molecular</i>	7,0%
• A. Lledós (UAB): <i>Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició</i>	6,9%
• F. Muñoz (UIB): <i>Reactivitat d'antibiòtics β i lactàmics</i>	6,1%
• F. Illas (UB): <i>Estructura electrònica i propietats de materials d'interès tecnològic</i>	6,0%
• J.M. Lluch (UAB): <i>Des de la Química Molecular fins la Biologia Molecular: Alguns fenòmens deguts a la dinàmica...</i>	5,6%
• J.M. Saà (UIB): <i>Catàlisi enantioselectiva</i>	3,8%
• C. Alemán (UPC): <i>Estructura i propietats dels polímers: càlculs electrònics, simulacions atomístiques i models...</i>	3,5%
• J.J. Novoa (UB): <i>Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic</i>	3,5%

Figura 17. El consum en els anys 1996-06

El 2006, gràcies a l'ajut per a infraestructures científiques i tecnològiques singulars, en el marc del Programa Nacional de Equipamiento e Infraestructura de Investigación Científica y Tecnológica del Ministerio de Educación y Ciencia, sis investigadors externs al Consorci han pogut tenir accés telemàtic als recursos del Centre.

A més, 21 investigadors del programa de mobilitat HPC-Europa Transnational Access han usat més de vuitanta mil hores computacionals al CESCA. Aquest programa de mobilitat, coordinat pel BSC-CNS, s'inclou dins el projecte Pan-European Research Infrastructure on High Performance Computing i finalitzarà el 2007.



Els visitants de més consum (2004-06):

1. Gloria Fuentes / Xavier Daura (UAB)	2005	MM	17,8%
2. Sinan Akpınar / Ramón Sayós (UB)	2006	QT	9,1%
3. Piero Ugliengo / Mariona Sodupe (UAB)	2004	QT	8,0%
4. Regla Ayala / Lourdes Vega (CSIC)	2005	MM	6,5%
5. Jacek Wojdel / Francesc Illas (UB)	2006	QT	5,6%

	Visites	HC
2004	10	16.441
2005	30	121.038
2006	16	80.976
Total	56	218.455

Figura 18. HPC-Europa: visites al CESCA

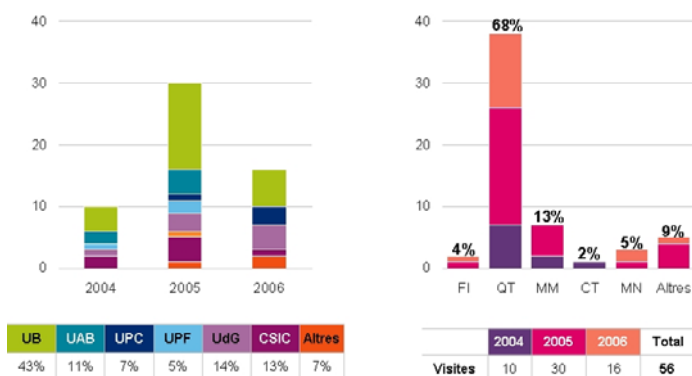


Figura 19. HPC-Europa: visites per institució i àrea de coneixement

3.2. El disseny de fàrmacs

Fa 10 anys un equip de tres laboratoris farmacèutics i dos grups acadèmics van tenir la iniciativa d'unir-se per demanar un ajut conjuntament que, amb el suport del CESCA, permetés crear un servei comú que els ajudés en la recerca en nous fàrmacs. Els beneficis de compartir recursos, tant de maquinari com de programari, han animat altres laboratoris i grups de recerca a unir-se al Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), que l'any 2006 ha estat integrat per setze grups de tot l'Estat, dels quals sis són industrials (Almirall Prodesfarma, Esteve, Grup Ferrer, Laboratoris Salvat, Grup Uriach i Neuropharma –que ha estat baixa a la fi de l'any) i la resta, acadèmics (dos de la UB, dos de la UAB, un de la UPC, un de la URV, un de l'IMIM, i tres del CSIC).



Figura 20. Els usuaris de l'SDF

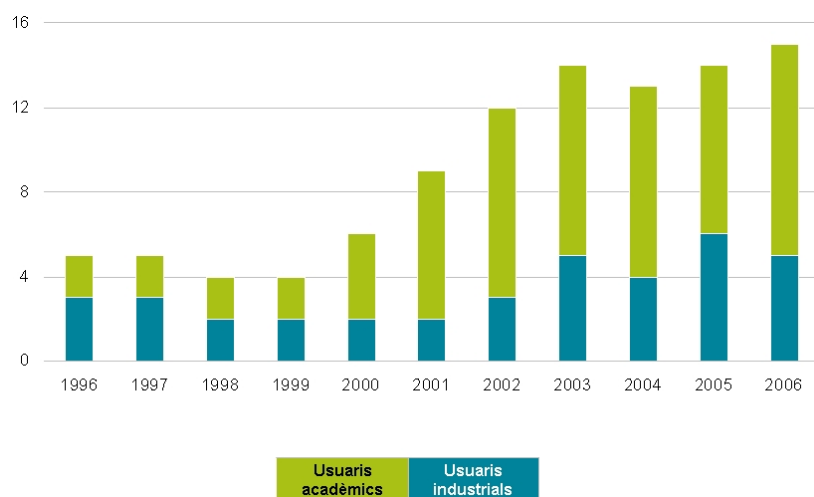


Figura 21. Evolució del nombre d'usuaris

Gràcies al patrocini rebut pel Ministerio de Educación y Ciencia per a la millora de les Grans Instal·lacions Científiques, aquest servei ha estat ampliat al febrer amb el programari Sybyl, de Tripos. Aquest programari està integrat per un conjunt de programes dedicats al disseny de fàrmacs que inclouen eines per a la cerca en bases de dades, modelatge macromolecular, generació de llibreries i anàlisis estadístiques (QSAR).

Les llicències disponibles per als usuaris durant un període de tres anys són dues de Sybyl, i una de QSAR, CombiLibMaker/Legion, Unity Base i Network 1-5 CPUS. A més, es disposa d'una llicència *wildcard* pels mòduls Confort, Selector, DiverseSolutions, Leapfrog, Advanced CoMFA i Biopolymer. Anualment es podrà revisar aquesta llista de mòduls per poder substituir-los per altres de més interès.

També s'ha actualitzat el programa Catalyst, d'Accelrys, a la versió 4.11. Aquest programari, orientat a la cerca de farmacòfors en bases de dades tridimensionals de compostos d'interès biològic, ha estat la base de l'SDF durant aquests anys, juntament amb diferents bases de dades. A més, als vuit mòduls de què es disposa de Catalyst, s'hi ha incorporat un de nou, HypoRefine, de generació de volums d'exclusió.

3.3. Els dipòsits d'e-informació

L'any 1999, com a fruit del llavors *Pla Estratègic Catalunya en Xarxa*, es va engegar conjuntament amb el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) el disseny d'un dipòsit col·lectiu per emmagatzemar, en format digital, el text complet de totes les tesis doctorals llegides a les universitats de Catalunya i difondre-les arreu del món, a través d'accés obert, és a dir, de l'accés lliure i gratuït per la xarxa, preservant els drets de propietat intel·lectual dels autors. Aquest servei, anomenat Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), va celebrar el mes de febrer el seu cinquè aniversari.

L'èxit assolit va fer que l'any 2005 la Generalitat de Catalunya patrocinés el desenvolupament de dos nous dipòsits amb accés obert: RECERCAT i RACO. El primer, en funcionament des de setembre de 2005, també amb la col·laboració del CBUC, és un dipòsit cooperatiu de documents digitals que inclou la literatura de recerca de les universitats i dels centres d'investigació de Catalunya. El segon dipòsit, posat en marxa el març de 2006, amb la col·laboració del CBUC i de la Biblioteca de Catalunya, difon amb accés obert revistes científiques, culturals i erudites catalanes.

Els tres dipòsits cooperatius permeten donar més visibilitat als documents indexats, en benefici tant dels propis autors com de les universitats i centres de recerca on s'han produït. Sense cap dubte faciliten una major difusió de l'activitat de recerca produïda a Catalunya i ajuden al desplegament de l'e-Ciència i de la Societat de la Informació en el nostre país.

A més, el 2006 la Biblioteca de Catalunya ha posat en marxa el dipòsit Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT), que recull i preserva tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital, on el CESCA hi participa com a soci tecnològic. Aquest dipòsit va començar a funcionar coincidint amb la celebració de la Diada Nacional de Catalunya.

Per millorar el rendiment de l'accés a aquests dipòsits, al març va entrar en funcionament un clúster d'e-informació, integrat per 10 nodes ProLiant DL360 G4p, que va ser ampliat a l'octubre a 16 nodes, cosa que ha permès reforçar, entre d'altres, la indexació i captura de webs per al dipòsit PADICAT. Aquest clúster proporciona una alta disponibilitat i una major escalabilitat en les consultes que reben els dipòsits d'e-informació.

3.3.1. Tesis Doctorals en Xarxa

El Servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) conté, en format digital, tesis doctorals llegides a les universitats de Catalunya i d'altres comunitats autònomes. Permet la consulta remota a través de la xarxa internet del text complet de les tesis, així com fer cerques per autor, títol, matèria de la tesi, universitat on s'ha llegit, etc. Els objectius d'aquest servei són difondre, arreu del món i a través d'internet, els resultats de la recerca universitària; oferir als autors de les tesis una eina que incrementa l'accés i la visibilitat del seu treball; millorar el control bibliogràfic de les tesis; impulsar l'edició electrònica i les biblioteques digitals i incentivar la creació i l'ús de la producció científica pròpia.

El TDX comptava a la fi de l'any amb 4.014 tesis a la seva base de dades, de les quals 992 han estat introduïdes el 2006. A més de les universitats consorciades, també hi participen sis universitats de la resta de l'Estat: la de les Illes Balears, la de València, la Jaume I, la de Cantàbria, la de Múrcia i la de A Coruña. Aquesta última universitat, incorporada a l'abril, ha proporcionat la traducció del TDX al gallec.



Figura 22. TDX: novetats de 2006

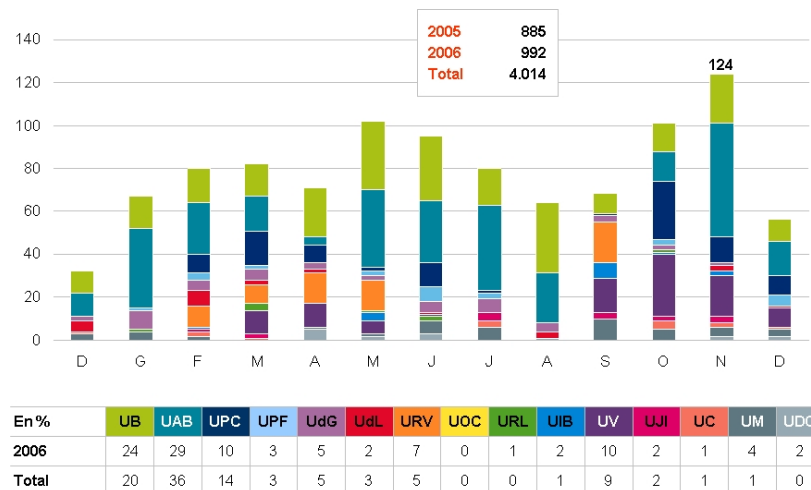


Figura 23. Tesis doctorals incorporades per universitat

A més d'aquesta millora en els idiomes disponibles, el servei ha ampliat les seves funcionalitats de manera que es permet consultar les tesis d'una manera més còmoda. S'han afegit més camps de cerca, com ara "Director" i "Departament", i el rang de dates en què la tesi es va defensar. També s'han afegit dues noves seccions, "Novetats" i "PMF", on es pot trobar resposta a les preguntes més freqüents.

Aquestes millores han facilitat els més de tres milions i mig de consultes rebudes, un 60% més que l'any anterior. Mentre que el 2005 aquest servidor rebia una mitjana de 184.330 consultes mensuals, l'any 2006 aquesta xifra ha pujat fins a les 295.303 consultes mensuals, assolint al novembre el rècord de consultes (378.932). Les tesis més consultades han estat les de la UAB (27%), seguides per les de la UPC (23%) i les de la UB (17%).

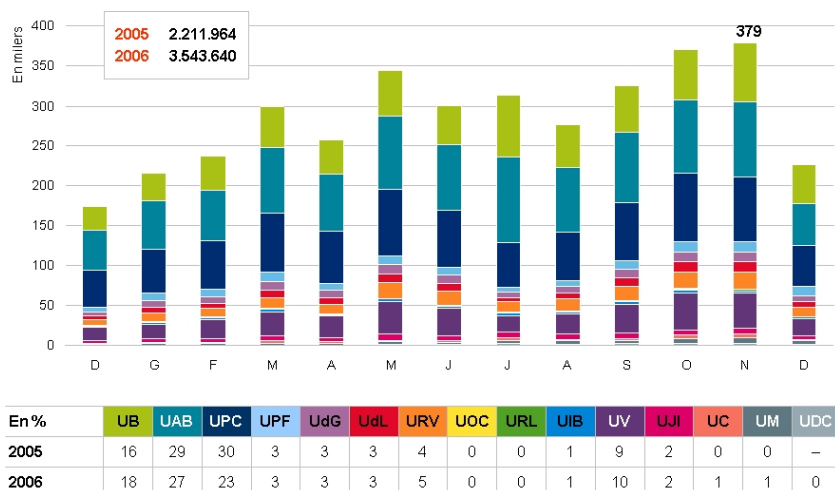


Figura 24. Tesis consultades de cada universitat

La universitat que més tesis ha incorporat el 2006 ha continuat sent la UAB, amb un 36%, seguida de la UB, amb un 20%, i la UPC, amb un 14%. El ritme d'incorporació de tesis s'ha mantingut estable, al voltant dels 6 mesos per cada 500, mentre que el ràtio de les tesis incorporades respecte a les llegides a Catalunya ha millorat lleugerament, una de cada dues llegides està ja disponible al TDX.

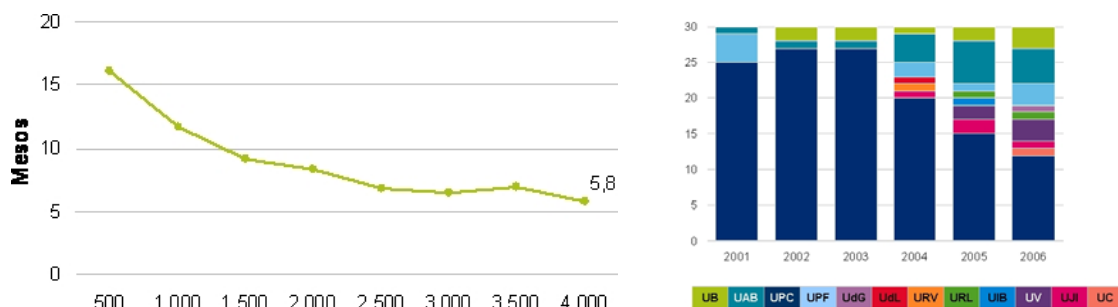
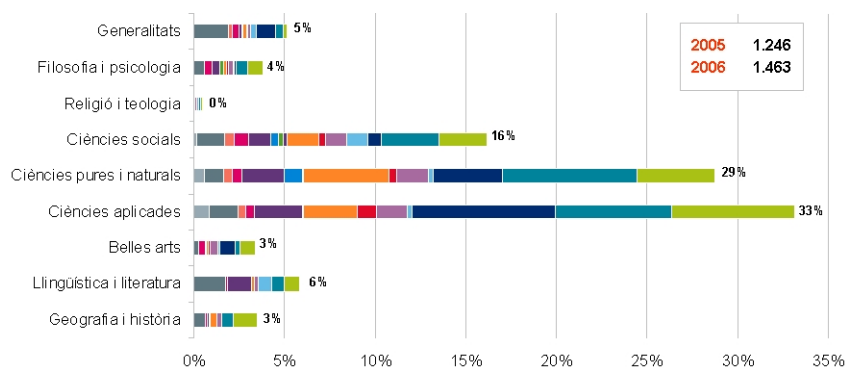


Figura 25. Ritme d'introducció de tesis i factor de penetració de la Societat de la Informació

Des de l'inici del TDX s'ha pogut constatar de forma positiva la penetració i el progrés de la Societat de la Informació en les diverses àrees de coneixement. Mentre que en els primers tres anys d'operació (2001-03) les tesis més consultades eren majoritàriament d'àrees tècniques (27 de les 30 més consultades), en el 2006 aquestes han suposat quasi dos terços (19 de les 30). L'any 2004, hi havien 20 de la UPC i 10 d'altres universitats, i al 2005 aquesta ràtio es va igualar. Al 2006, les tesis consultades s'han diversificat encara més de forma que 12 són de la UPC, 5 de la UAB, 3 de la UB, la UV i la UPF, i 1 de la UJI, la UC, la UdG i la URL.



En %	UB	UAB	UPC	UPF	UdG	UdL	URV	UOC	URL	UIB	UV	UJI	UC	UM	UDC
2005	18	20	21	3	6	4	5	0	1	2	11	2	3	5	–
2006	18	20	14	3	6	2	10	0	1	1	8	3	2	9	2

Figura 26. Distribució de tesis per matèria i universitat

Per tercer any consecutiu, la tesi més consultada, també en el rànquing acumulat, és *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*, de l'autor Gerardo Javier Macías, dirigida pel Dr. Mario Herreros, presentada en el Dept. de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB i llegida el febrer de 2003.

Les altres tesis més consultades durant el 2006 de cada universitat han estat les següents:

- *Educación del razonamiento lógico matemático en educación infantil*, de M^a Pilar Ruesga, dirigida per Mariela Orozco i Joaquim Giménez, presentada en el Departament de Didàctica de les Ciències Experimentals i la Matemàtica de la UB, llegida el juliol de 2003 i introduïda el juliol de 2003.
- *Motor asíncrono trifásico con rotor de chapas en espiral*, de Ramón M^a Mujal, dirigida per Oriol Boix, presentada en el Departament d'Enginyeria Elèctrica de la UPC, llegida l'abril de 2004 i introduïda el maig de 2004.
- *Gastos contables y gastos fiscales en el impuesto sobre sociedades*, de Sonia Martín, dirigida per Antonia Agulló, presentada en el Departament de Dret de la UPF, llegida el juny de 2001 i introduïda el febrer de 2004.
- *Estudio de la aplicación de sistemas basados en el conocimiento a la operación de una planta de tratamiento de residuos sólidos urbanos por valorización energética*, de Xavier Llauro, dirigida per Manuel Poch, presentada en el Departament d'Enginyeria Química, Agrària i Tecnologia Agroalimentària de la UdG, llegida el desembre de 1999 i introduïda el gener de 2003.
- *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón*, de Jordi Pagan, dirigida per Albert Ibarz, presentada en el Departament de Tecnologia d'Aliments de la UdL, llegida el desembre de 1999 i introduïda el gener de 2003.

- *Síntesis de carboximetilcelulosa (CMC) a partir de pastas de plantas anuales*, de Claudia Barba, dirigida per Xavier Farriol i Daniel Montané, presentada en el Departament d'Enginyeria Química de la URV, llegida el juny de 2002 i introduïda l'agost de 2002.
- *Innovació tecnològica, creixement econòmic i economia del coneixement: una aproximació empírica, agregada i internacional a la incorporació del coneixement a l'activitat productiva durant la dècada dels noranta*, de Joan Torrent, dirigida per Jordi Vilaseca, presentada a l'Internet Interdisciplinary Institut de la UOC, llegida el juliol de 2002 i introduïda el desembre de 2002.
- *Historia, sociedad, tecnología y crecimiento de la Red. Una aproximación divulgativa a la realidad más desconocida de Internet*, d'Andreu Veà, dirigida per Jordi Dalmau, presentada en el Departament d'Empresa i Tecnologia de la URL, llegida el setembre de 2002 i introduïda el novembre de 2004.
- *El incumplimiento esencial del contrato de compraventa internacional de mercaderías*, d'Anselmo Martínez, dirigida per Guillermo Alcover, presentada en el Departament de Dret Privat de la UIB, llegida el novembre de 2001 i introduïda el març de 2005.
- *Ética y razón universal en el pensamiento de Santo Tomás de Aquino*, d'Aquilino Cayuela, dirigida per Jesús Conill, presentada en el Departament de Filosofia del Dret, Moral i Política de la UV, llegida l'octubre de 2002 i introduïda el febrer de 2004.
- *Percepción Artificial de dibujos lineales*, d'Ana Piquer, dirigida per Pedro Company, presentada en el Departament de Tecnologia de la UJI, llegida el novembre de 2003 i introduïda el febrer de 2004.
- *Metodología y herramientas UML para el modelado y análisis de sistemas de tiempo real orientados a objetos*, de Julio Luis Medina, dirigida per José María Drake, presentada en el Departament d'Electrònica i Computadors de la UC, llegida el setembre de 2005 i introduïda el febrer de 2006.
- *Conocimiento previo, esquemas de género y comprensión lectora del inglés como lengua extranjera*, dirigida per Rafael Monroy, de Piedad Fernández, presentada en el Departament de Filologia Anglesa de la UM, llegida el febrer de 2000 i introduïda el novembre de 2005.
- *Cálculo y diseño asistido por ordenador de tomas de tierra en instalaciones eléctricas: Una formulación numérica basada en el método integral de elementos de contorno*, d'Ignasi Colominas, dirigida per Fermín Luis Navarrina, presentada en el Departament de Mètodes Matemàtics i de Representació de la UDC, llegida el maig de 1995 i introduïda l'abril de 2006.

Coincidint amb l'inici del curs acadèmic, es van emetre els primers certificats de reconeixement a les tres tesis més consultades de cada universitat que participa al TDX. Amb aquests 36 certificats lliurats a través de cada universitat es pretén reconèixer la popularitat de la recerca duta a terme, contrastada per l'elevat nombre de consultes rebudes, gràcies a la visibilitat que el TDX proporciona.



Figura 27. Certificats de reconeixement

Pel que fa als accessos per dominis, el major nombre d'accessos continuen realitzant-se des del domini genèric *.net* (un 26%) i des de països de parla hispana, com ara Mèxic (11%), Espanya (9%) i Perú (7%).

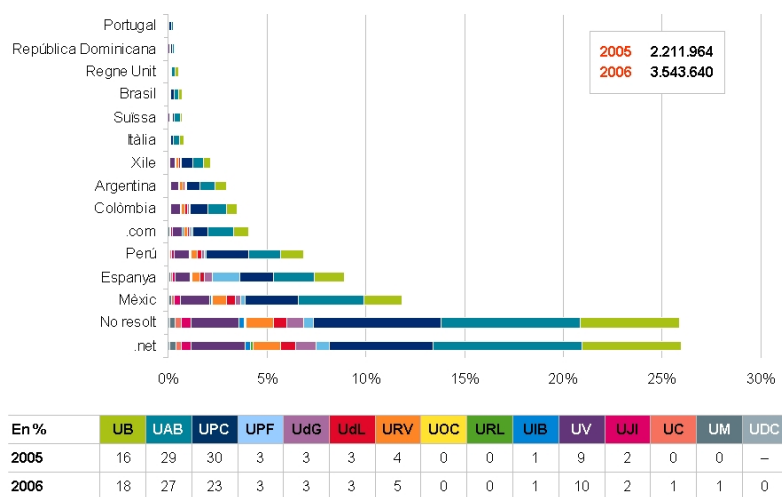


Figura 28. Consultes per país/domini i universitat

Durant l'any 2006 s'han aconseguit diferents fites al TDX. A l'abril, la Universidade da Coruña (UDC) va introduir la seva primera tesi, que porta per títol *Partículas, Volúmenes Finitos y Mallas no Estructuradas: Simulación Numérica de Problemas de Dinámica de Fluidos*, de Luis Cueto-Felgueroso, i ha estat dirigida pel Dr. Ignasi Colominas. Aquesta investigació, com explica el seu director, “proposa una metodologia de partícules per a la simulació numèrica de problemes de flux de fluids comprensibles i incomprensibles, aprofundint tant en els aspectes més teòrics relatius als fonaments matemàtics i numèrics del mètode proposat, com en aquells relacionats amb la resolució i anàlisi de problemes en enginyeria civil, industrial o aeronàutica, entre d'altres”.

Segons José María Barja, rector de la UDC, “el TDX s'ha convertit en poc temps en un referent d'aquest tipus de serveis a Espanya”, ja que “permet un accés a les tesis doctorals d'una manera senzilla, immediata i eficaç”. El rector també ha destacat que el TDX proporciona “un accés universal i gratuït al coneixement científic tal com promou la Declaració de Berlín que la UDC ha subscrit”.

El desembre, la UAB va incorporar la tesi número 4.000 al TDX. Es tracta de la tesi d'Irantzu Pallarès amb títol *Proteases i inhibidors com a models per a estudis de relació estructura-funció i agregació*, que ha estat dirigida per Josep Vendrell i Salvador Ventura, i presentada en el Departament de Bioquímica i Biologia Molecular de la UAB.

Pel que fa a les tesis disponibles de cada universitat, la Universitat de València va incorporar al maig la seva tesi número 300; la UPF, al juny, la 100; la UB, al juliol, la 700 i, al novembre, la UAB, 1.400, la UdG, 200, i la UdL, 100 (vegeu annex XIV).

Al juny es va incorporar la tesi *El daño ecológico puro. La responsabilidad civil por el deterioro del medio ambiente*, que ha obtingut el primer guardó dels V Premios para tesis doctorales y trabajos de investigación sobre protección civil atorgats per la Dirección General de Protección Civil y Emergencias del Ministerio del Interior. Aquesta tesi ha estat escrita per Albert Ruda, dirigida per Miquel Martín i presentada en el Departament de Dret Privat de la UdG.

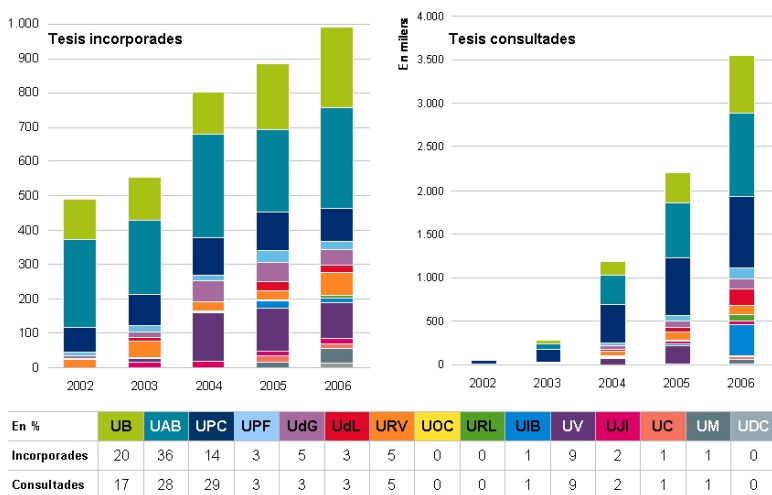


Figura 29. L'evolució del TDX

A l'annex VI hi ha les tesis doctorals més consultades en general o, si s'escau, les tres més consultades de cada universitat l'any 2006. També es detalla l'evolució històrica de les tesis incorporades per universitat durant els últims cinc anys, entre altres estadístiques.

3.3.2. Dipòsit de la Recerca de Catalunya

El Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT), posat en marxa el setembre de 2005, és un dipòsit 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, documents de treball (*working papers*), projectes de final de carrera, memòries tècniques, etc.

Aquest dipòsit comptava a la fi de 2006 amb 13 institucions, 36 col·leccions i més de tres mil documents consultables. Tots ells són d'accés lliure i estan subjectes a la llicència Creative

Commons de *Reconeixement-NoComercial-SenseObraDerivada*. Quasi el 60% d'aquests documents estan emmagatzemats a RECERCAT, mentre que a la resta, de la UPC, s'hi accedeix a través de les metadades.

El 2006, s'hi han creat 21 noves col·leccions de 10 institucions, les quals han aportat 1.629 documents. La UAB ha estat la institució que més documents ha incorporat (68%), seguida de l'AGAUR (9%) i la UdG (8%). Del total de documents que conté RECERCAT, la UPF és la institució que més en té disponibles (45%), seguida de la UAB (40%), i de la UB (7%).



Figura 30. Recercat: novetats de 2006

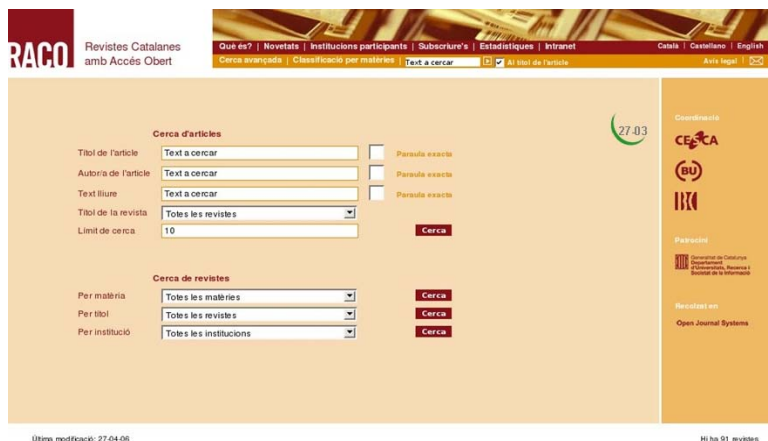
Pel que fa a millores en el dipòsit, s'ha actualitzat el seu programari base, DSpace, de la versió 1.2 a la 1.4. Aquesta nova versió compleix amb els criteris d'accessibilitat UI XHTML/WAI i està internacionalitzada, és a dir, el codi font i el text es troben separats de manera que ha facilitat la traducció als diferents idiomes (català, castellà i anglès).

També incorpora noves funcionalitats en les cerques, que poden ser per matèries, així com en la preservació dels documents, ja que inclou una eina que verifica periòdicament la validesa dels fitxers incorporats. La nova versió incorpora també millores en el rendiment de la base de dades que agilitzen les cerques i faciliten l'accés als documents, entre altres. A més, la migració d'aquest dipòsit al clúster d'e-informació n'ha millorat el rendiment, com s'explica a la secció 3.3.5.

3.3.3. Revistes Catalanes amb Accés Obert

El servidor de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) és un dipòsit des del qual es poden consultar en accés obert els articles a text complet de revistes científiques, culturals i erudites catalanes. La principal finalitat de RACO és augmentar la visibilitat i consulta de totes les revistes que inclou; facilitar l'edició digital en mans de cada editor, que serà el responsable de mantenir la informació de la revista, amb els seus propis criteris i la seva pròpia política en la demora del text complet, i assegurar la preservació del patrimoni documental per difondre la producció científica i acadèmica.

Aquest dipòsit va ser posat en marxa el mes de març amb 91 revistes disponibles i, a la fi de l'any, RACO ja n'incorporava 116 de 24 institucions editorials participants. Així, aquest dipòsit ha permès consultar prop de trenta mil articles en més de dos mil números de revista.



The screenshot shows the RACO search interface. At the top, there are navigation links: 'Què és?', 'Novetats', 'Institucions participants', 'Subscriure's', 'Estadístiques', 'Intranet', 'Català', 'Castellano', 'English'. Below these are search options: 'Cerca avançada', 'Classificació per matèries', 'Text a cercar', and 'Al títol de l'article'. The main search area is divided into two sections: 'Cerca d'articles' and 'Cerca de revistes'. Each section has several input fields and dropdown menus for filtering results, along with 'Cerca' buttons. On the right side, there is a sidebar with logos for 'Coordinació' (CESCA, UB, IIR) and 'Patrocini' (Departament de Cultura, Departament d'Ensenyament Superior i Recerca, Departament de Recerca i Innovació Tecnològica). At the bottom, it says 'Hi ha 91 revistes'.

<http://www.raco.cat>

Figura 31. Revistes Catalanes amb Accés Obert



Figura 32. Digitalització de 15 revistes

A més de la incorporació de revistes actuals, se n'ha potenciat la digitalització retrospectiva, gràcies al patrocini de la Secretaria de Telecomunicacions i Societat de la Informació. Així, s'han destinat 20.000 € per subvencionar la digitalització retrospectiva de 15 revistes de 10 institucions, que representen quasi vuitanta mil pàgines de més de quatre-cents exemplars.

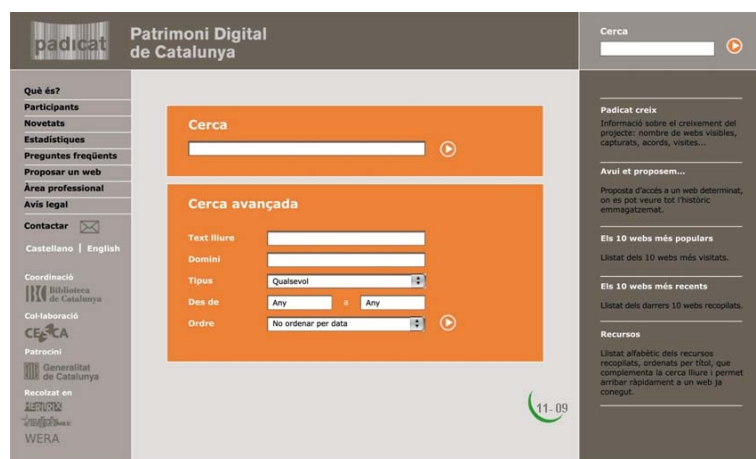
Les institucions que més revistes han incorporat a RACO han estat l'IEC (34), la UAB (25) i la UPC (13). Per nombre d'articles disponibles, la UAB és la que en té més, prop de deu mil, seguida de l'IEC, amb quasi cinc mil, i la Fundació CIDOB, que amb només tres revistes té prop de 2.800 articles a RACO.

Pel que fa a millora del seu programari, s'ha traduït el text de l'anglès al català del programa de codi lliure OJS, desenvolupat pel Public Knowledge Project, i que permet la seva modificació i adaptació a les necessitats del dipòsit. Un cop implementat el català a RACO, els arxius que contenen la traducció catalana s'han posat a disposició de la comunitat OJS contribuint així al desenvolupament i avenç del programari lliure en català.

També s'han implementat i integrat a l'OJS dos nous mòduls. L'un ha permès la classificació de les revistes per matèries seguint l'estàndard CDU (Classificació Decimal Universal), que s'usa per classificar les ciències i àrees de coneixement universals. L'altre mòdul ha facilitat la simplificació dels passos a seguir perquè els editors publiquin els articles al dipòsit.

3.3.4. Patrimoni Digital de Catalunya

Coincidint amb la celebració de la Diada Nacional de Catalunya es va posar en marxa PADI-CAT, un nou dipòsit coordinat per la Biblioteca de Catalunya que pretén recollir i preservar tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital.



<http://www.padi.cat>

Figura 33. Patrimoni Digital de Catalunya

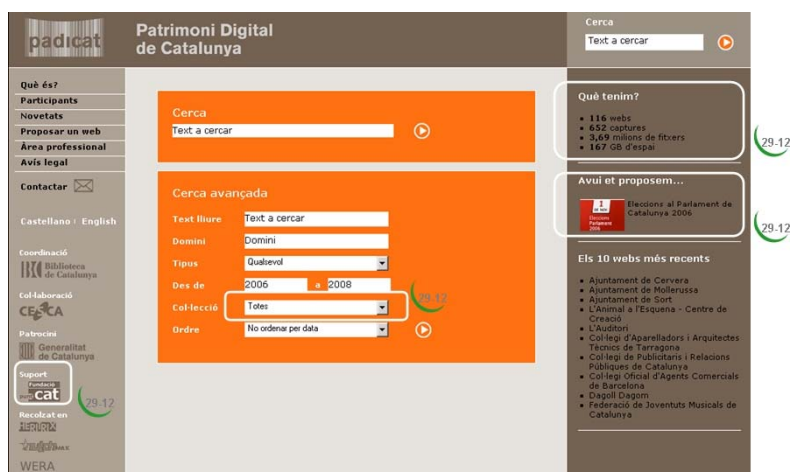
El mes de juliol es van començar a recopilar de manera automatitzada els webs susceptibles de formar part del Patrimoni Digital de Catalunya, essent els primers els de l'Ajuntament de Berga i de Palafrugell, i els dels col·legis professionals d'Aparelladors i Arquitectes Tècnics de Tarragona i de diplomats en Treball Social i Assistents Socials de Catalunya. A la fi de l'any, aquest dipòsit comptava amb 646 captures de 110 webs, que representen més de tres milions i mig de fitxers i ocupen 167 GB d'espai en disc.

L'abast temàtic de PADI-CAT se centra en els webs sota el domini *.cat*, sota altres dominis (*.es*, *.com*, *.net*, etc.) en llengua catalana, ubicats a servidors de Catalunya o altres webs que no compleixen els requisits anteriors però que estan relacionats temàticament amb Catalunya.

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

Una funcionalitat de PADICAT és que permet crear col·leccions. Així, amb motiu de les eleccions al Parlament de Catalunya se'n va fer una captura focalitzada. Es van definir una sèrie de recursos digitals (webs de partits polítics amb i sense representació parlamentària, blocs personals, webs dels candidats, mitjans de comunicació, recursos digitals institucionals, fundacions polítiques i societats de recerca, etc.) i la periodicitat de captura necessària per assegurar, en el futur més immediat, poder accedir a les diferents versions d'aquesta producció digital.

Les captures es van realitzar amb una periodicitat de tres dies per als webs dels partits polítics amb representació parlamentària i d'una setmana per als de la resta de partits que van presentar candidatura i altres portals de notícies i blocs personals relacionats amb les eleccions. En total, es van capturar 620 versions de 83 recursos digitals relacionats amb les eleccions, que ocupen 161 GB.



<http://www.padi.cat>

Figura 34. PADICAT: col·leccions i estadístiques

3.3.5. El clúster d'e-informació

El clúster d'e-informació per als dipòsits i portals universitaris està format per 16 nodes ProLiant DL360 G4p de memòria compartida de dues vies cadascun, amb un total de 148 GB de memòria principal i 1,21 TB en discs Ultra320. Cada un dels nodes compta amb 2 processadors Intel Xeon de doble nucli a 3,0 GHz, 2 MB de memòria cau L2 i un disc intern per al sistema operatiu, l'àrea de *swap* i fitxers temporals.

El clúster està estructurat en tres nivells de servei per als dipòsits d'e-informació i portals: un primer de balanceig de peticions IP, un segon d'execució d'aplicacions (Apache, Tomcat...) i un tercer nivell d'execució dels gestors de bases de dades (MySQL, PostgreSQL...). Tots ells són redundants i estan funcionant en mode *failover* de manera que si falla un, el servei s'inicialitza en un altre. D'altra banda, s'han dedicat tres nodes per executar l'Oracle 10g RAC i migrar-hi la base de dades del projecte GAIA i dos nodes per a la captura i la indexació de PADICAT.

Els dipòsits RACO i PADICAT, posats en marxa el 2006, s'han instal·lat en aquest clúster, mentre que RECERCAT hi ha estat migrat a la fi de l'any. Aquest dipòsit s'havia instal·lat el 2005 al servidor de bases de dades HP rp5430, de l'any 2003, i després de la migració s'ha pogut constatar una millora considerable tant en el temps de resposta com en les desviacions (figura 35).

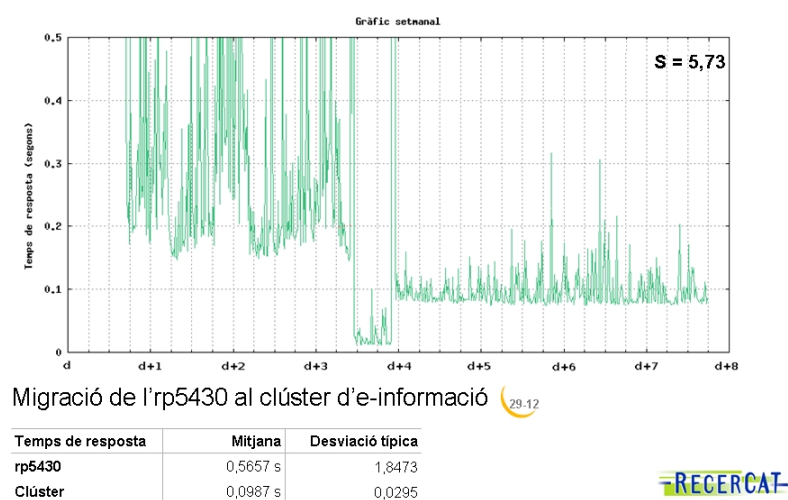


Figura 35. Millora en el temps de resposta

Mentre que a l'HP rp5430 el temps de resposta era en mitjana de 0,57 segons al clúster d'e-informació és de 0,10 segons, de manera que és 5,73 vegades més ràpid. Pel que fa a la desviació típica, el clúster ha aportat una major estabilitat en els temps de resposta de les consultes a RECERCAT. A l'rp5430, els temps més baixos estaven al voltant dels 0,2 segons, però eren variables amb una desviació típica d'1,85. En canvi, la desviació al clúster està al voltant dels 0,03 segons, cosa que fa que els temps de resposta, a més de ser més baixos, siguin estables.

3.4. Els portals i bases de dades universitàries

Des de l'any 2000, el CESCA hostatja portals i bases de dades, universitàries o relacionades amb la Societat de la Informació, de les institucions consorciades i de les adherides a l'Anella Científica, per tal que el seu accés sigui més eficient i segur. El ventall de serveis que ofereixen és ben ampli: gestions i informació acadèmica, continguts digitals de caire històric, difusió de l'ús de les TIC, revistes erudites, etc.

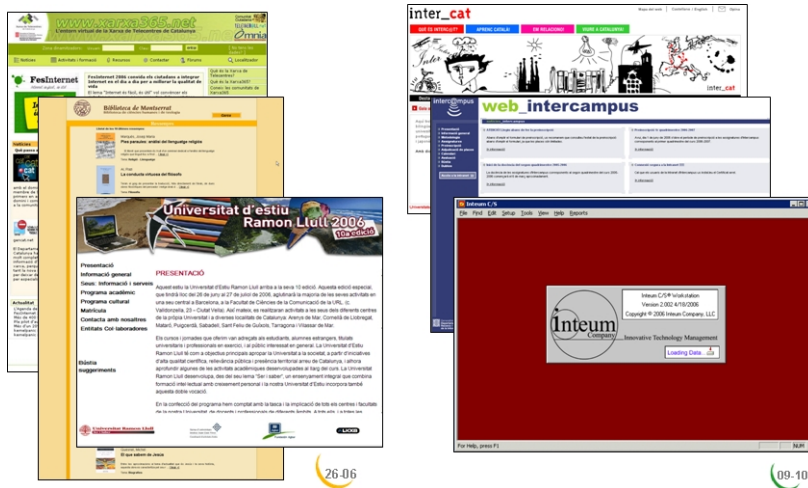


Figura 36. Portals i bases de dades universitàries

Durant el 2006 s'ha incorporat a aquest servei l'Inteum, un programari de gestió de la propietat intel·lectual que engloba la totalitat de les fases d'aquest procés. El Consorci de Transferència de Coneixement, que ha signat un acord amb diverses universitats per gestionar aquest programari, ha establert un acord de col·laboració amb el CESCA per disposar d'aquest servei, entre altres. Pel que fa a portals ja existents, s'ha actualitzat el web d'Intercat. A continuació es descriuen els webs que usen aquest servei:

a) *Contributions to Science*

El web de la publicació *Contributions to Science* (<http://www.cat-science.com>), de l'IEC, promou a nivell internacional la recerca científica feta a Catalunya, en qualsevol de les seves branques, ambdues pures i aplicades. Aquesta publicació es fa ressò d'articles, comunicacions, notes i notícies d'interès internacional en qüestions d'història, economia, societat, política o investigació a Catalunya o a les seves àrees d'influència. La revista també publica estudis desenvolupats a totes les parts del món per científics de països vinculats amb Catalunya.

b) *Aprentatge del català*

Amb el nom d'Intercat (<http://intercat.gencat.net>) s'han aplegat, en un mateix espai, tot un seguit de recursos per aprendre català mitjançant l'ús de les noves tecnologies. Així, aquest web inclou SpeakCat, un curs bàsic de català; la Guia de conversa universitària, que conté la traducció de les paraules d'ús més usual en 7 idiomes; i Sisplau, un recull d'exercicis de llengua catalana de nivell inicial, adreçat especialment a estudiants de programes d'intercanvi que fan una estada a les universitats catalanes, o que comencen algun ensenyament.

A més, aquest espai també conté informació sobre la situació de la llengua a Catalunya i sobre els programes d'acollida cultural i d'intercanvi de llengües que ofereixen les universitats catalanes.

Intercat és una iniciativa dels serveis lingüístics de nou universitats catalanes i de la Direcció General d'Universitats, cofinançada per la Comissió Europea, el DURSI i les universitats públiques catalanes.

c) Intercampus

El web d'Intercampus (<http://www.catcampus.org>), un projecte elaborat per un conjunt d'universitats catalanes amb el patrocini de l'STISI, i que té com a objectiu desenvolupar l'intercanvi d'assignatures de lliure elecció que s'imparteixen mitjançant internet. És a dir, gràcies a aquest servei es permet cursar assignatures virtualment, sense haver d'assistir físicament a les classes. Intercampus, que es va iniciar el segon quadrimestre del curs 1999-2000, ja ha impartit assignatures a prop d'uns 6.000 estudiants de les universitats de tot Catalunya que participen en el projecte.

d) Barcelona Centre Universitari

El web del Barcelona Centre Universitari, (<http://www.bcu.cesca.es>), ofereix informació sobre recursos que poden ser útils per al futur estudiant en la vida quotidiana a la ciutat i que contribueix a fer més fàcil i còmoda la seva estada. Així, la missió d'aquest servei, patrocinat per la Direcció General d'Universitats, és impulsar, coordinar i dirigir totes les accions que la Generalitat de Catalunya, l'Ajuntament de Barcelona, les universitats de Barcelona ciutat a més de la seva àrea d'influència, i la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació considerin convenients per a la promoció de Barcelona com a centre universitari internacional.

e) Centre UNESCO de Catalunya

Al web oficial de la seu de la UNESCO a Catalunya, l'Organització de les Nacions Unides per a l'Educació, la Ciència i la Cultura, (<http://www.unescocat.org>), es poden trobar les línies essencials d'actuació d'aquesta entitat. L'organització treballa per difondre els ideals, documents i activitats en l'àmbit educatiu i patrimonial per donar accés al coneixement i garantir la sostenibilitat ambiental, fomentant la cultura de la pau, l'educació en valors i en els drets humans, la diversitat cultural i lingüística, i el diàleg interreligiós.

f) Consell Consultiu de la Generalitat

El web del Consell Consultiu de la Generalitat (<http://www.cconsultiu.es>) dona difusió de les mateixes activitats del Consell, alhora que ofereix continguts sobre la institució, la normativa per la qual es regeix i informació sobre la seva biblioteca, les seves publicacions, etc. En els dictàmens que emet es pot trobar la doctrina que el Consell Consultiu ha elaborat durant els més de vint anys d'existència sobre les lleis i altres normes, la seva constitucionalitat i la seva adequació a l'Estatut d'Autonomia de Catalunya.

g) Sistema d'informació d'Universitats i Recerca de Catalunya

El sistema d'informació d'Universitats i Recerca de Catalunya, Uneix (<http://uneix.gencat.net>), és un portal d'accés restringit que permet l'accés al personal autoritzat pel Departament d'Innovació, Universitats i Empresa, la institució que el promou. Uneix compila dades de totes les universitats per modelar uns perfils estadístics de l'evolució de la universitat i, en funció d'aquestes dades, es facilita la presa de decisions.

Aquest web és el resultat d'un procés dut a terme conjuntament per l'aleshores anomenat DURSI i les set universitats públiques catalanes, amb la finalitat de millorar la informació estadística en què es fonamentaven els estudis, la planificació, la programació i la presa de decisions en l'àmbit del sistema universitari públic de Catalunya.

h) Observatorio para la CiberSociedad

El web de l'Observatorio para la CiberSociedad (<http://www.cibersociedad.net>) és un punt de trobada, discussió i publicació d'investigacions sobre els diversos aspectes que les noves tecnologies de la informació i la comunicació estan generant. Els objectius que busca són estimular la investigació i la curiositat sociològica sobre el ciberespai, entenent aquest com un fenomen sociocultural, i no merament tecnològic, proporcionant textos sobre la temàtica i els enllaços apropiats. A més, es configura com un espai de consulta, recerca i assessorament per a la investigació i la divulgació sobre allò que és ciberocial.

i) Fundació Observatori per a la Societat de la Informació de Catalunya

Al web de la Fundació Observatori per a la Societat de la Informació de Catalunya (<http://www.fobsic.net>) es proporciona informació sobre els objectius de la Fundació, així com dels seus patrons fundacionals. A més, es facilita un enllaç als principals indicadors estadístics que recull la Fundació i que estan disponibles al web de l'STSI.

j) Universitat Ramon Llull

El web de la Universitat Ramon Llull (<http://www.url.edu>) ofereix informació sobre la pròpia universitat i els estudis que s'hi poden cursar, així com sobre les 10 institucions federades. A més de continguts adreçats als estudiants, tant locals com estrangers, es proporciona informació a empreses interessades en col·laborar amb la universitat en innovació i transferència de tecnologia. Aquest portal també informa de les notícies i les activitats de la universitat i els seus campus.

k) Biblioteca de Montserrat

El web de la Biblioteca de Montserrat (<http://www.bibliotecademontserrat.net>) proporciona informació sobre els registres que conté el catàleg de l'Abadia de Montserrat, corresponents al fons de monografies, manuscrits, incunables, catàlegs de segle XVI, cartografia, gravats i publicacions periòdiques.

l) Xarxa de Telecentres de Catalunya

El portal de la Xarxa de Telecentres de Catalunya (<http://www.xarxa365.cat>) està adreçat sobretot a les persones que dinamitzen els gairebé 500 telecentres que formen part de la Xarxa de Telecentres de Catalunya. Aquesta xarxa està integrada per punts públics d'accés a internet, els telecentres, que tenen per objectius principals la cohesió digital i l'equilibri territorial de Catalunya en la societat del coneixement.

m) FesInternet

El web FesInternet (<http://www.fesinternet.net>) és l'espai creat des de l'STSI per ajudar i encoratjar la ciutadania a entrar a internet. Va néixer al voltant de la Festa d'Internet de l'any 2005 quan, des de l'STSI, es va decidir encunyar aquest esdeveniment com una forma de difondre i d'estendre l'ús de la xarxa.

3.5. Altres activitats en Sistemes

Durant el 2006, el Departament de Sistemes ha gestionat les consultes adreçades a les seves diferents àrees d'activitat i ha realitzat un seguit de tasques per millorar el funcionament intern dels serveis del CESCA. D'una banda, s'ha posat en marxa una interfície per a la reserva electrònica de sales (figura 37), que utilitza el programari lliure Meeting Room Booking System i que ha permès traduir-lo al català. Ara bé, el sistema operatiu HP-UX, que usa la màquina que l'allotja, no disposa de la traducció dels missatges del sistema al català i, per aquest motiu, algunes parts de la interfície, com ara el calendari, es mantenen en castellà. D'altra banda, s'ha ampliat el sistema de reserves del Servei de Disseny de Fàrmacs per incorporar-hi el programari Sybyl, de Tripos.

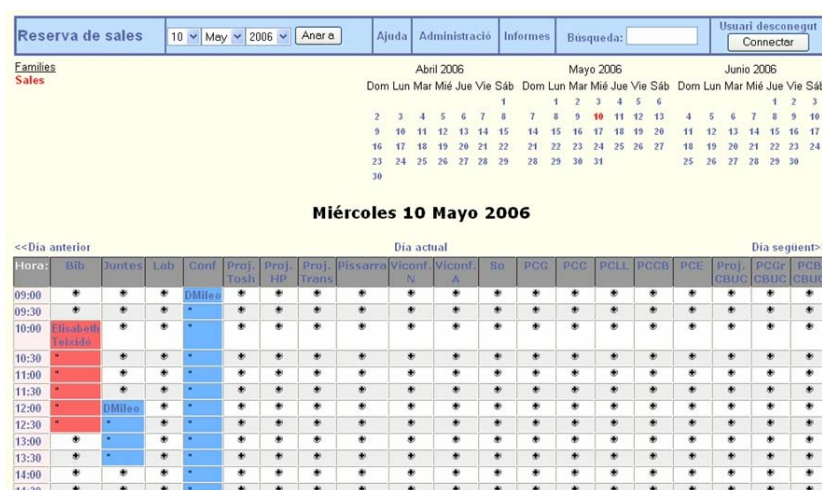


Figura 37. Reserva de sales

Pel que fa a l'editor del web, s'hi ha introduït noves funcionalitats com ara un sistema de control i de bloqueig de les pàgines que estan sent modificades pels usuaris i noves eines d'edició que faciliten la generació de continguts tenint en compte el nou disseny.

S'ha posat en marxa un Monitor de Rendiment de Dipòsits i Portals (MTR), un sistema automàtic de comprovació del funcionament i el rendiment dels webs hostatjats. Així, es pot monitorar el temps de resposta tant de la pàgina principal dels webs com de la resolució de les consultes (figura 38). Aquest sistema ha permès, per exemple, comprovar la millora en el rendiment del dipòsit RECERCAT quan ha estat migrat al clúster d'e-informació (figura 35).

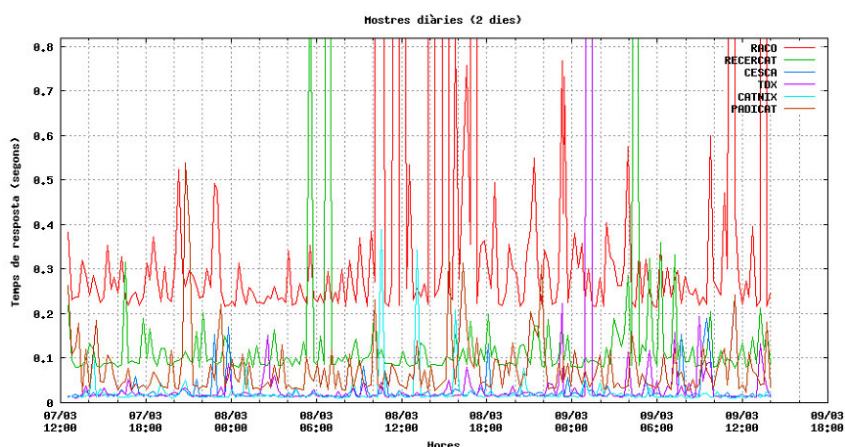


Figura 38. Monitor de Rendiment de Dipòsits i Portals

S'han rebut 1.808 consultes (figura 39), de les quals un 58% s'han resolt al moment. Els usuaris han preguntat especialment sobre portals (36%), supercomputació (30%), GAIA (20%), dipòsits (10%), SDF (3%) i SED (1%).

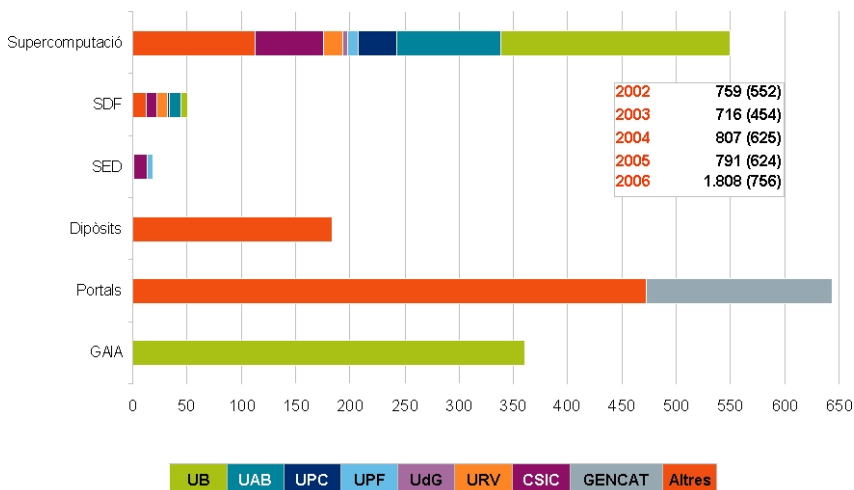


Figura 39. Les consultes de Sistemes

4. Les comunicacions

Per al món de la universitat i la recerca és imprescindible gaudir d'unes bones infraestructures de comunicacions per garantir el desenvolupament de l'e-Ciència i de la Societat de la Informació a Catalunya. Per això, l'any 1993 el CESCA va desplegar una xarxa d'altres prestacions, anomenada Anella Científica, amb la finalitat de permetre llavors una bona accessibilitat dels usuaris als recursos de supercomputació i avui dia a tots els recursos disponibles per internet, amb qualitat de servei i banda ampla.

A més de permetre l'accés a internet, l'Anella Científica també ofereix tota una sèrie de serveis de valor afegit: accés remot, per facilitar el teletreball; autenticació, per facilitar la mobilitat; seguretat, per respondre de forma coordinada a les incidències produïdes (infeccions, atacs, correu brossa...); certificació digital, per fer les transaccions electròniques més segures; veu sobre IP, per reduir el cost de les trucades interprovincials a Barcelona, etc.

L'Anella està connectada a la xarxa de recerca estatal RedIRIS, gestionada per Red.es, mitjançant el seu node allotjat al CESCA. A través d'aquest s'accedeix a les xarxes de les altres comunitats autònomes (l'andalusa RICA, la gallega RECETGA, la basca i2BASK...), a la paneuropea Géant2 i, a través d'ella, a les internacionals més avançades de recerca, l'americana Internet2, la canadense CA*net-4, l'asiàtica TEIN2, etc.

L'any 1999 es va crear el Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) per afavorir l'intercanvi de tràfic entre els diferents proveïdors d'internet i assegurar l'accessibilitat de la informació universitària a tots els ciutadans. Aquest també proveeix de diversos serveis de valor afegit com ara el *multicast*, l'IPv6, el servidor arrel de noms F, el servidor de prefixos *bogon*...

A més de la gestió de l'Anella i del CATNIX, s'administra tota la infraestructura bàsica del Centre, com són servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, màquines allotjades, hostatjades, etc.

La taula següent mostra l'evolució dels indicadors de comunicacions:

Indicadors de comunicacions	2002	2003	2004	2005	2006
Anella Científica					
Institucions adherides	41	47	51	54	57
≥ 500 Mbps		4	6	8	8
De 100 a 155 Mbps	3	11	12	11	12
De 10 a 34 Mbps	15	16	21	25	27
De 2 a 4 Mbps	8	2	3	4	6
< 2 Mbps	15	14	9	6	4
Punts d'accés	27	37	53	66	73
Capacitat agregada (Mbps)	502	1.653	2.111	3.730	6.242
Tràfic intercanviat (TB)	215,11	560,05	662,47	1.260,71	2.920,75

Indicadors de comunicacions	2002	2003	2004	2005	2006
Serveis addicionals (SxAC)					
Articles llegits ($\times 10^6$)	5,74	3,95	0,86	0,52	0,28
Peticions al <i>proxy-cache</i> ($\times 10^6$)	502,23	188,37	93,59	126,66	366,90
Peticions a l' <i>ftp mirror</i> ($\times 10^3$)	112,34	39,75	44,14	59,97	87,01
SAR: institucions (usuaris)	11 (3.943)	12 (2.271)	13 (3.408)	13 (6.595)	12 (817)
SEG: incidents de seguretat ¹		66	205	178	233
SCD: certificats en circulació			44	126	249
RedIRIS					
Interconnexió amb l'Anella (Mbps)	155	1.000	2.000	4.000	4.000
Connexió a TEN/Géant (Mbps)	2.500	10.000	10.000	10.000	10.000
Tràfic enviat (TB)	213,40	460,79	712,14	1.199,61	2.013,50
Tràfic rebut (TB)	171,63	288,22	476,37	906,97	2.165,20
CATNIX					
Entitats connectades	14	18	17	21	19
≥ 100 Mbps	5	8	9	13	11
de 8 a 68 Mbps	6	5	5	5	5
≤ 6 Mbps	3	5	3	3	3
Tràfic intercanviat (TB)	271,44	667,75	1.014,67	725,00	665,75
Altres serveis					
Servidors allotjats+hostatjats	8+23	11+82	11+88	12+43	16+48
Consultes	1.068	1.162	1.247	1.147	868

¹Des del 6 de maig de 2003.

Les seccions que segueixen descriuen cadascun d'aquests serveis.

4.1. L'Anella Científica

L'Anella Científica és la xarxa de comunicacions d'alta velocitat creada l'any 1993 per l'FCRI i gestionada pel CESCA, que connecta universitats i centres de recerca a Catalunya. L'Anella, a més de disposar de la sortida a internet mitjançant RedIRIS, també disposa d'una pròpia que li permet establir polítiques diferencials, a part d'una excel·lent connectivitat amb altres operadors i ISP a través del CATNIX.

Des de maig de 2003, l'Anella Científica està basada en tecnologia Gigabit Ethernet, proveïda majoritàriament per Al-Pi Telecomunicacions. Durant aquests anys ha demostrat ésser una xarxa flexible i escalable que ha anat incrementant considerablement tant el nombre d'institucions, com el de punts d'accés, posant de manifest la seva consolidació com a una infraestructura clau per al desenvolupament de l'e-Ciència i la Societat de la Informació a Catalunya.

El 2006 s'han modificat les categories d'adhesió a l'Anella Científica per ampliar el seu abast (figura 40). D'una banda, s'ha creat una nova categoria per a les unitats de recerca hospitalàries (A.4) que poden gaudir de connectivitat a través de RedIRIS i que fins ara estaven classificades

sota el genèric “Institucions de recerca” (A.3), el qual ha passat a “Centres i institucions de recerca”. De l'altra, s'ha generat la nova categoria “Altres unitats hospitalàries” (C.2) per als hospitals que participen en els programes docents universitaris. Aquests últims disposen de connectivitat a internet través dels propis enllaços del CESCA.

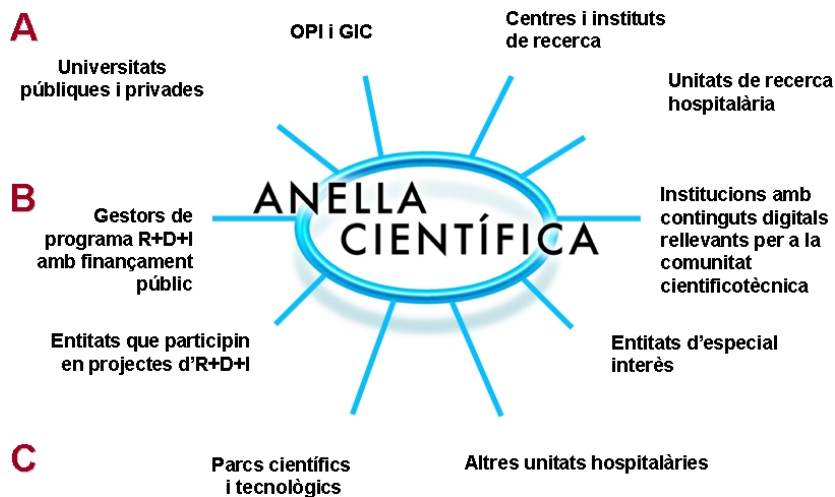


Figura 40. Categories d'adhesió a l'Anella

També s'ha redefinit la política de tarifes de l'Anella, de manera que les quotes de totes les institucions adherides són ara independents de la seva ubicació geogràfica, facilitant la cohesió territorial. És a dir, s'han eliminat totes les tarifes interprovincials i les provincials per a la primera connexió, tant per a les institucions adherides com per a les vinculades. Per exemple, un centre de recerca connectat a 10 Mbps fins al 2005 tenia una quota de 1.740 € si estava ubicat a les comarques de Girona, Lleida o Tarragona, de 1.326 € a les comarques de Barcelona, i de 900 € a Barcelona ciutat, mentre que per al 2006 la quota és de 900 €, independentment de la seva ubicació geogràfica.

Amb l'objectiu d'avaluar el rendiment de les connexions de l'Anella s'ha posat en marxa una nova plataforma conformada per un HP ProLiant DL320 i el programari necessari per analitzar l'amplada de banda de les institucions connectades i comprovar l'eficàcia de la seva connexió. D'aquesta manera, les institucions poden comprovar el bon funcionament de la connexió tant en el moment inicial com quan ja està en funcionament.

Tal com indicà la prorrogació del contracte de prestació de servei de l'Anella, de maig de 2005 a abril de 2008 amb Al-Pi Telecomunicacions, aquest any s'ha facilitat la connexió per fibra òptica del campus de la UAB a Sabadell, el 9 de març; de l'Escola Universitària Politècnica de la UPC, a Mataró, el 18 de maig, i del campus Bellisens de la URV, a Reus, el 5 de desembre. A més, s'està treballant perquè la fibra connecti institucions a Vic, Igualada i Tortosa.

Des de l'any 2004, el CESCA disposa d'adreçament propi per a les institucions connectades a l'Anella Científica. Des d'aleshores, s'han assignat adreces IPv4 del rang de l'Anella per primera vegada a 17 institucions, mentre que quatre han sol·licitat i disposen també d'adreçament IPv6. De les institucions connectades amb anterioritat, nou han sol·licitat adreçament de

L'Anella i han renumerat o estan en procés de renumeració IPv4. Pel que fa a les renumeracions IPv6, dues institucions han canviat d'adreçament. En concret, al llarg de 2006, les institucions que han sol·licitat adreçament IPv4 de l'Anella han estat, la Fundació Hospital Asil de Granollers (FHAG), el Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona (PRBB), la Fundació Barcelona Media (FBM), la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat i l'Institut Cartogràfic de Catalunya (ICC). La UPC ha sol·licitat adreces IPv6.

4.1.1. Institucions i punts d'accés

El nombre d'institucions connectades a l'Anella ha anat augmentant fins arribar a 57, amb la incorporació de l'FBM, que comparteix el punt d'accés de la UPF; el PRBB i l'FHAG (figura 41). També s'ha produït la connexió de dues institucions ja adherides: l'Abadia de Montserrat i el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT).

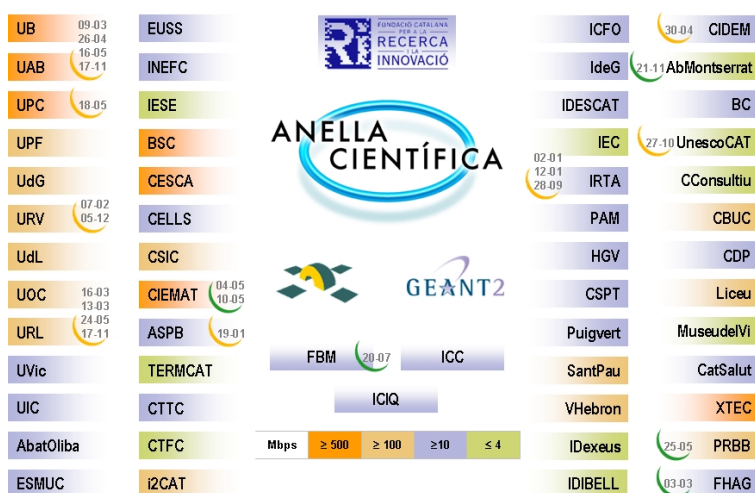


Figura 41. Institucions connectades

Els punts d'accés connectats directament amb l'Anella s'han incrementat en 11. Dos del CIEMAT, un del PRBB, un de la URV, un de l'FHAG, un altre de la UAB, tres de l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentària, un del Centre Unesco de Catalunya i un de l'Abadia de Montserrat.

També s'han produït increments de cabal en 12 punts d'accés. El de la UAB a Bellaterra ha passat d'1 Gbps a 2 Gbps per al projecte LHC del PIC; el de la UPF, de 100 Mbps a 110 Mbps amb un nou port per a l'FBM; el de la URV a Tarragona, de 100 Mbps a 140 Mbps amb un nou port; el del Campus de Tortosa de la URV de dues ADSL a 4 Mbps cadascuna a un únic punt a 34 Mbps; el del Campus de Sabadell de la UAB, de 34 Mbps a 100 Mbps amb fibra; els de cinc centres de la URL i l'Agència de Salut Pública de Barcelona, de 10 a 20 Mbps, i el de l'Escola Universitària Politècnica de Mataró, de 10 a 100 Mbps també amb fibra.

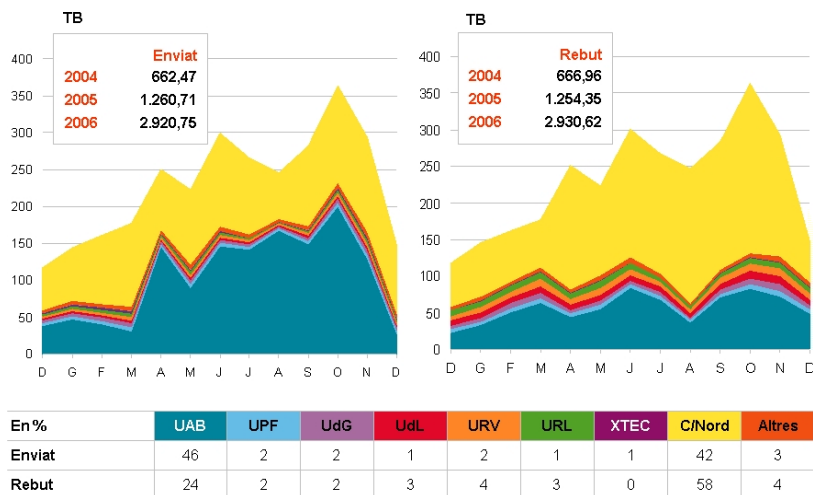


Figura 44. El tràfic per punt d'accés

Pel que fa al desplegament d'IPv6, el nombre d'institucions que el fan servir encara és baix, ja que la majoria d'aplicacions i serveis d'internet funcionen amb IPv4 o amb IPv4 i IPv6 i no hi ha una necessitat expressa d'implementar IPv6. Enguany, s'ha connectat la Universitat Politècnica de Catalunya en IPv6 natiu. Aquesta institució es connecta en IPv6 des del mes de setembre i ja dona alguns serveis en natiu, com el seu servidor web.

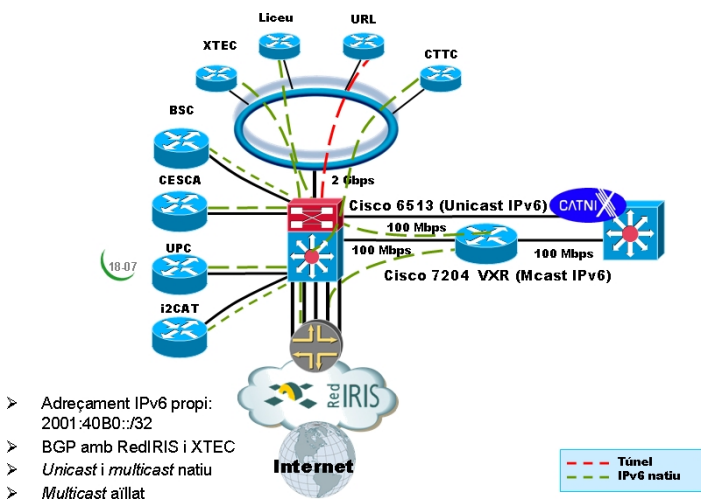


Figura 45. Topologia IPv6 de l'Anella Científica

4.1.2. Flexibilitat d'ús

La tecnologia en què es basa l'Anella Científica permet dotar-la de més flexibilitat i escalabilitat, gràcies al fet que és fàcil de gestionar i de mantenir, la qual cosa permet implementacions de xarxa a baix cost, proporciona una bona flexibilitat topològica i garanteix una bona interconnexió i total compatibilitat.

Aquesta flexibilitat de l'Anella permet, per tant, fer connexions internes a les institucions amb seus separades geogràficament. A continuació es comenten cinc exemples d'aquesta flexibilitat d'ús.

4.1.2.1. El cas de la UAB

La Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) interconnecta els seus campus gràcies a la flexibilitat que li permet l'Anella. Aquesta universitat utilitza tecnologies i velocitats d'accés a l'Anella molt diverses, que van des de 2 Mbps amb Frame Relay del punt d'accés de Flor de Maig a 1 Gbps Giganet del punt d'accés de Bellaterra, passant per les ADSL a 2 Mbps de la FUB i l'IGOP, els punts d'accés Giganet a 10 Mbps de l'IGTP i el CESC i els de 100 Mbps de l'HUVH i el Camp de Sabadell, també sobre Giganet.

En concret, cada seu té una xarxa privada virtual (VLAN) amb el CESCA per la sortida a internet i les seus tenen una altra VLAN amb la seu principal de la universitat, que es troba a Bellaterra. Les seus de més de 34 Mbps també participen a una VLAN multipunt per la que s'intercanvien tràfic amb altres institucions de l'Anella. Des de Bellaterra hi ha una VLAN per a Òpera Oberta separada de la resta del tràfic normal de la institució, amb amplada de banda i qualitat de servei garantits.

Els punts d'accés als que es connecten algunes de les seus de la UAB són compartits amb altres institucions, com és el cas del punt de l'HUVH, compartit amb l'Hospital Universitari de la Vall d'Hebron i del mateix punt d'accés de Bellaterra, compartit per UAB i PIC.

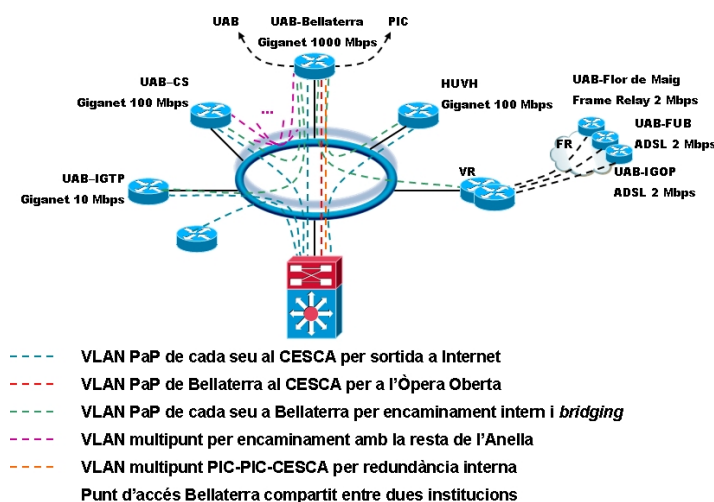


Figura 46. La flexibilitat d'ús: el cas de la UAB

4.1.2.2. El cas de la URV

La Universitat Rovira i Virgili (URV) també utilitza la infraestructura de l'Anella per interconnectar els seus campus. Aquesta universitat té tres seus connectades, una a Tarragona, una a Reus i una altra a Tortosa. Les dues primeres disposen de tecnologia Giganet i un cabal de 140 Mbps Ethernet i 100 Mbps, respectivament, i la darrera, de 34 Mbps Ethernet. La URV utilitza la infraestructura de l'Anella Científica per connectar internament la seu de Tortosa

amb la de Tarragona, i així disposar de redundància entre les dues seus connectades amb Gigabit, formant un triangle entre els punts d'accés de Tarragona i Reus.

D'aquesta manera, es facilita tant la sortida a internet d'ambdues seus en cas de caiguda de la seva línia interna, com l'encaminament del tràfic en cas que un dels dos enllaços amb l'Anella caigui. La seu de Tarragona participa també en la xarxa multipunt d'encaminament intern amb un conjunt de membres de l'Anella, de manera que hi ha visibilitat directa entre les universitats i els centres connectats, sense cap salt intermig.

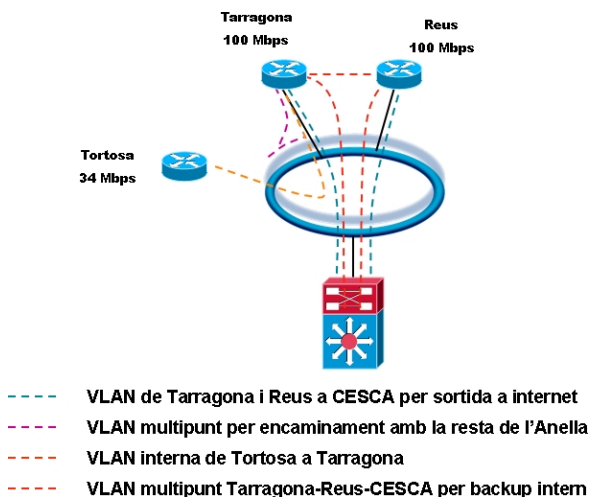


Figura 47. La flexibilitat d'ús: el cas de la URV

4.1.2.3. El cas de la UOC

La Universitat Oberta de Catalunya (UOC) utilitza la infraestructura de l'Anella Científica per sortir a internet, per fer connexions internes entre les seves seus de la ciutat de Barcelona (Tibidabo i 22@) i la de Castelldefels (IN3), i per disposar de redundància de les seves pròpies línies, que transporten tant dades i encaminament intern, com veu sobre IP.

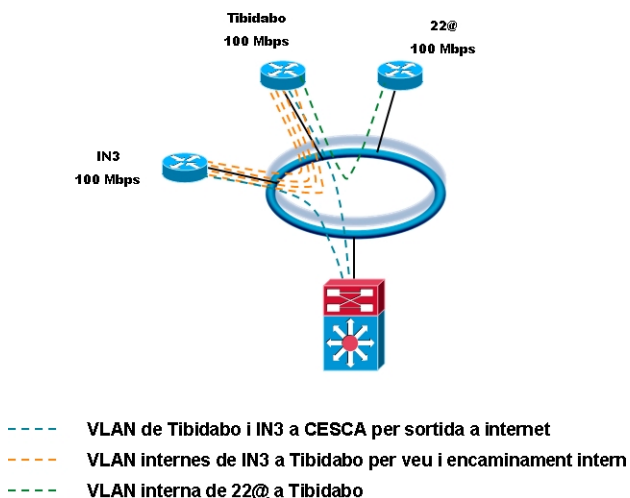


Figura 48. La flexibilitat d'ús: el cas de la UOC

Els tres punts d'accés de la UOC són Giganet a 100 Mbps. Aquesta universitat, donat que té dues sortides a internet, disposa del seu propi rang d'adreces i les anuncia dinàmicament al CESCA, qui les passa a la resta d'universitats de l'Anella, al CATNIX i a RedIRIS per a la seva distribució a la xarxa.

4.1.2.4. El cas de la URL

La Universitat Ramon Llull (URL) és la institució que té més punts d'accés connectats a l'Anella Científica, amb cabals de 2 Mbps per a les línies ADSL de La Salle a Tarragona i l'Observatori de l'Ebre, 10 Mbps per a l'IQS i l'FPT, 20 Mbps per a la FundEmi, la Fundació Blanquerna i l'ETSI i 100 Mbps per a ESADE i La Salle Barcelona. Per això, utilitza activament l'Anella per ajustar els diversos esquemes de xarxa de les institucions federades als seus requisits.

Així, totes les seues tenen una VLAN punt a punt amb el CESCA per a la sortida a internet, excepte la de La Salle a Tarragona, que passa primer a través de La Salle Barcelona, també gràcies a un circuit dedicat dins de l'Anella. Les seues de les Fundacions Blanquerna i Pere Tarrés s'enllacen amb una altra xarxa virtual punt a punt i el punt d'accés de La Salle Barcelona participa en la VLAN multipunt d'intercanvi de tràfic amb altres universitats i centres de recerca de l'Anella Científica. La tecnologia emprada als diferents punts d'accés és, excepte per les dues ADSL, Giganet.

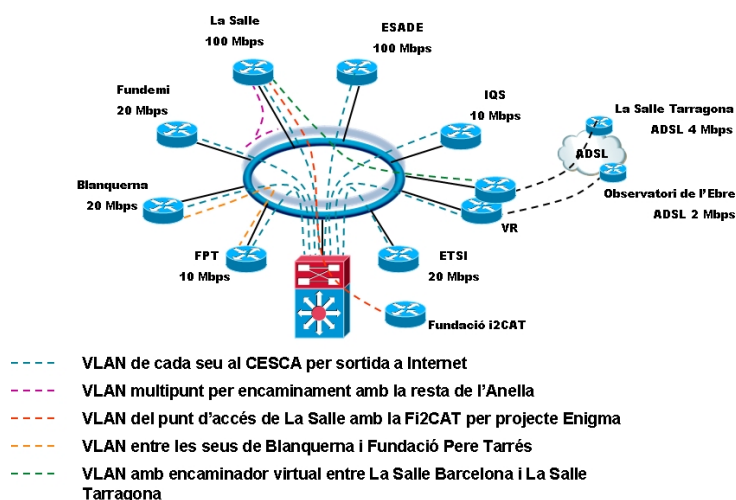


Figura 49. La flexibilitat d'ús: el cas de la URL

4.1.2.5. El cas per a projectes especials

Una altra de les utilitats que permet portar a terme l'Anella és la creació de circuits dedicats per a projectes puntuals, tant a nivell local com a nivell internacional. Els més destacats enguany han estat els projectes User Controlled LightPath (UCLP) de la Fundació i2CAT, amb circuits cap a RedIRIS, Géant, SurfNet, DFN, Ca*Net4, KREOnet2 o HEANET'.

Gràcies a aquests circuits es va retransmetre, per exemple, el DancingQ 2006, amb un flux de televisió d'alta definició no comprimida (*uncompressed* HDTV) de gairebé 1 Gbps des de Korea.

Aquest espectacle de dansa es va retransmetre des de l'LG ArtCenter Auditorium de Seül fins al Quebec i Barcelona, que va acollir aquest acte al Mercat de les Flors. A més d'aquest i altres circuits per a projectes UCLP, la Fundació i2CAT té actualment un altre circuit temporal amb la URL dedicat al projecte Enigma, una plataforma per a la integració d'MPLS i QoS en xarxes IP, i dos circuits punt a punt amb el CESCA per a la seva sortida a internet, tant amb IPv4 com amb IPv6.

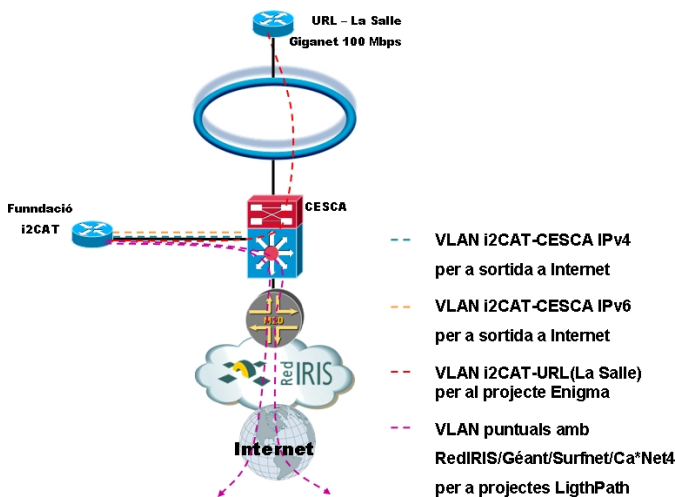


Figura 50. La connexió de la Fundació i2CAT

També, la infraestructura de l'Anella Científica permet realitzar altres activitats amb circuits dedicats, separats de la resta del tràfic, amb cabal i qualitat de servei garantits; com és el cas de l'Òpera Oberta, un curs universitari de lliure elecció en el qual es retransmeten òperes en directe amb emissions d'alta qualitat des del Gran Teatre del Liceu de Barcelona. Per fer la retransmissió cap a les universitats connectades a l'Anella Científica, els equips del CESCA repliquen el flux de l'òpera que reben del Liceu i el retransmeten a les set universitats catalanes i a RedIRIS, que al seu torn retransmet cap a la resta d'universitats o xarxes que participen, tal com es comentarà més endavant.

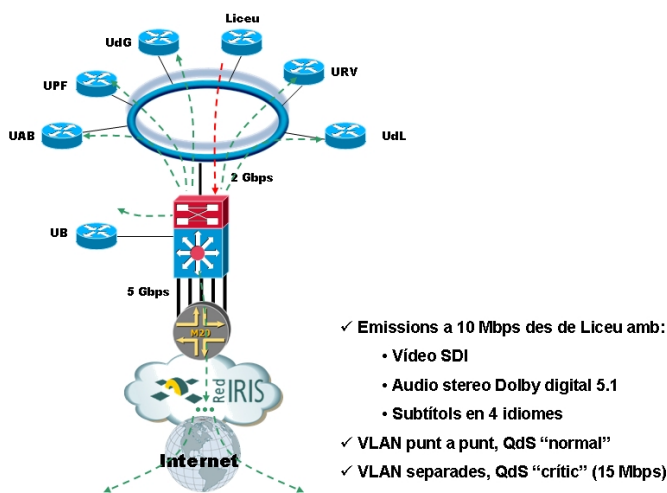


Figura 51. La retransmissió de l'Òpera Oberta

4.2. Els serveis addicionals de l'Anella Científica

A més del transport, l'Anella Científica també ofereix tota una sèrie de serveis de valor afegit que es descriuen a continuació, en ordre cronològic de creació.

4.2.1. News

El servei de *news*, ofert des de la fi de 1997, està estructurat en grups temàtics i actua com un taulell d'anuncis on es pot trobar informació sobre els temes més diversos en forma d'articles o *news*.

El nombre de peticions al servidor de *news* s'ha reduït quasi a la meitat, seguint la tendència iniciada el 2003. Aquesta disminució ha estat conseqüència dels canvis en els hàbits d'ús de la xarxa. Per això, RedIRIS està estudiant la discontinuïtat del servei.

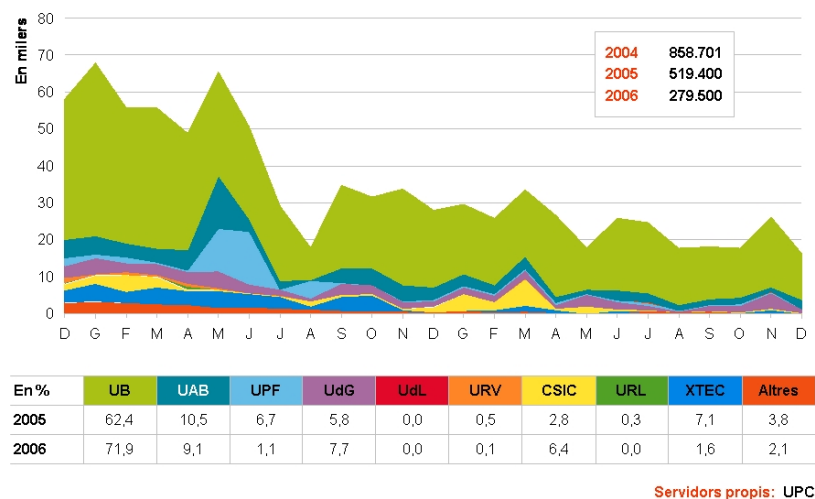


Figura 52. Els articles llegits per institució

4.2.2. Multimèdia

El servei de multimèdia s'ofereix a les institucions connectades a l'Anella Científica des de l'abril de 1997. El que originalment va néixer com a pilot de *multicast* amb les institucions connectades amb túnels va evolucionar i actualment es dóna suport a iniciatives que fan servir *multicast* natiu tant en IPv4 com en IPv6. També s'ofereix la possibilitat de realitzar videoconferències a les institucions que ho sol·liciten.

Una de les iniciatives que fa servir *multicast* natiu, tant en IPv4 com en IPv6, és l'Òpera Oberta. La seva particularitat és que les òperes es retransmeten en directe des del Liceu per internet amb una qualitat molt elevada d'àudio (Dolby Digital 5.1) i vídeo (MPEG-2 de 8 Mbps), que permeten que els alumnes assisteixin a les òperes des de les sales d'actes de les seves universitats.

El 2006, el cinquè any d'Òpera Oberta, ha comptat amb 8.608 assistents, 2.780 procedents de Catalunya (figura 53), un 51% més que l'any anterior. S'han retransmès cinc òperes per a 34 universitats de l'Estat espanyol, tres mexicanes, dues a Portugal, una a França, una a Suïssa, i a la Universitat d'Andorra, per a un total de 39 campus. La UPC va donar-se de baixa a principis de 2006.

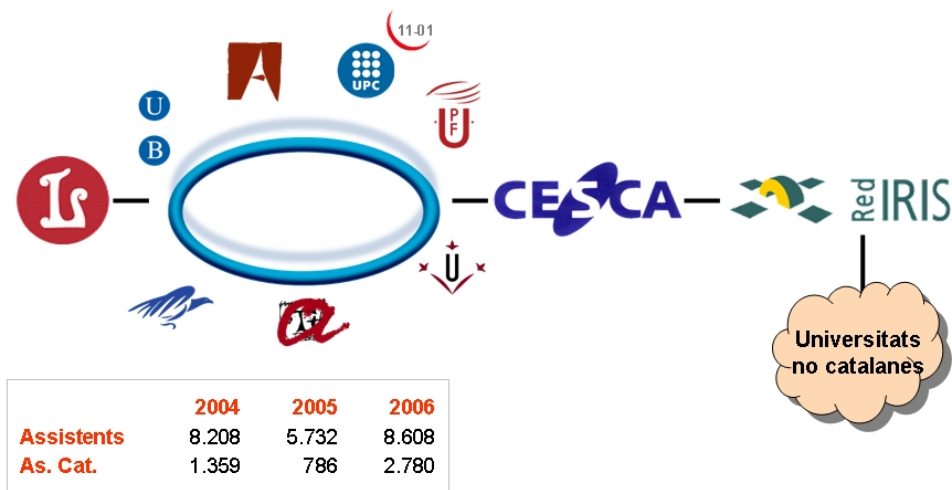


Figura 53. L'Òpera Oberta

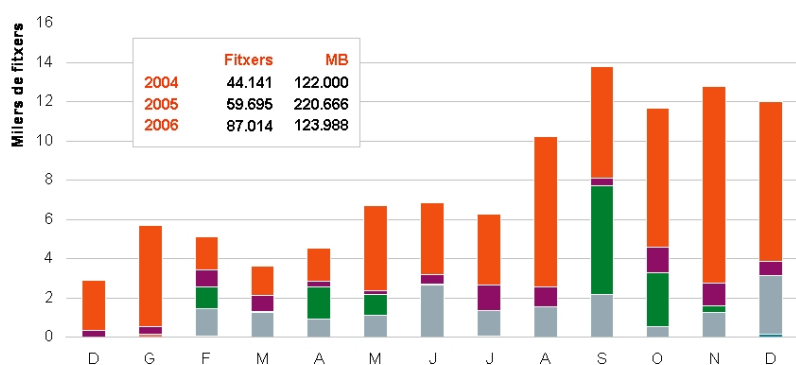
A més, el servei de multimèdia ofereix la possibilitat de celebrar videoconferències per a reunions punt a punt o reunions multipunt de diferents grups de treball distants geogràficament, proporcionant un estalvi de temps i de costos de desplaçament als investigadors de les institucions connectades a l'Anella Científica. Enguany, s'han realitzat un total de 12 videoconferències.

4.2.3. DNS

El servei de DNS es basa en una estructura jeràrquica, on milions de servidors al món tenen part de la informació necessària perquè internet funcioni. Disposar de secundaris d'un domini és de vital importància per millorar la seguretat i la disponibilitat d'aquest servei.

El CESCA proporciona a l'Anella Científica un servidor secundari del domini *.es* des del mes de maig de 1995. Enguany, s'ha modificat el servei de DNS per tal que tots els membres de l'Anella puguin mantenir una rèplica dels seus dominis *.cat*, després que aquest domini va ésser reconegut el mes de febrer. El *.cat* és un domini genèric adreçat específicament a la comunitat lingüística i cultural catalana a internet i del qual s'allotja una rèplica.

Arrel d'aquesta modificació i a proposta de la Comissió Tècnica de l'Anella Científica, s'ha estès el servei DNS perquè els membres de l'Anella puguin usar-lo com a servidor secundari per als seus dominis addicionals, com per exemple el *.edu*. A més, el DNS també s'ha posat en marxa sobre IPv6, no només per resoldre consultes IPv6 sinó per rebre i enviar peticions en IPv6 natiu.



En%	UB	UAB	URL	CTTC	IRTA	CESCA	CBUC	PAM	Altres
Fitxers	0,0	0,5	0,0	0,0	0,1	17,1	12,6	9,0	60,9
MB	0,5	1,0	0,3	0,2	0,7	9,0	8,9	34,6	44,1

Figura 55. El servidor d'*ftp-mirror*: fitxers per institució

El Servei d'Accés Remot (SAR) estén, des de 1999, els serveis de l'Anella Científica més enllà de les connexions de les institucions, ja que ofereix connexió a través de la xarxa telefònica bàsica i la xarxa digital de serveis integrats. Així, professors, investigadors, PAS i estudiants, si la institució ho autoritza, poden accedir als recursos restringits de les seves institucions en un entorn similar al que tenen en el seu lloc de treball.

Enguany ha tingut 817 usuaris d'11 de les institucions adherides. Fins el 2006, es comptava el nombre d'usuaris potencials del servei, que va arribar a ser de 6.595, però des d'enguany es comptabilitzen els usuaris reals que l'han utilitzat, d'aquí que sembli que el nombre de l'indicador hagi patit una gran davallada. Si bé és cert que el fet que cada vegada més usuaris comptin amb connexions ADSL domèstiques ha fet disminuir el nombre de connexions remotes a través de la xarxa de telefonia bàsica, el SAR segueix sent un servei d'utilitat sobretot per als usuaris de la UAB i la UB, ja que per accedir a alguns dels recursos de les seves institucions necessiten fer-ho des d'adreces IP de l'Anella Científica.

També des de l'any 1999 s'ofereix el Servei d'Accés Directe (SAD) per donar connectivitat a les institucions adherides a l'Anella i no afiliades a RedIRIS, com per exemple els Parcs Científics i Tecnològics. També el poden usar les institucions dins l'àmbit universitari, de recerca o societat de la informació que vulguin hostatjar o allotjar els seus webs o servidors que no hagin de sortir per RedIRIS. Enguany ha enviat 1.609 GB d'informació i n'ha rebut 412. Aquest servei l'usen alguns usuaris del SAR, varies institucions de l'Anella, com ara l'FHAG o el Museu del Vi i alguns servidors allotjats.

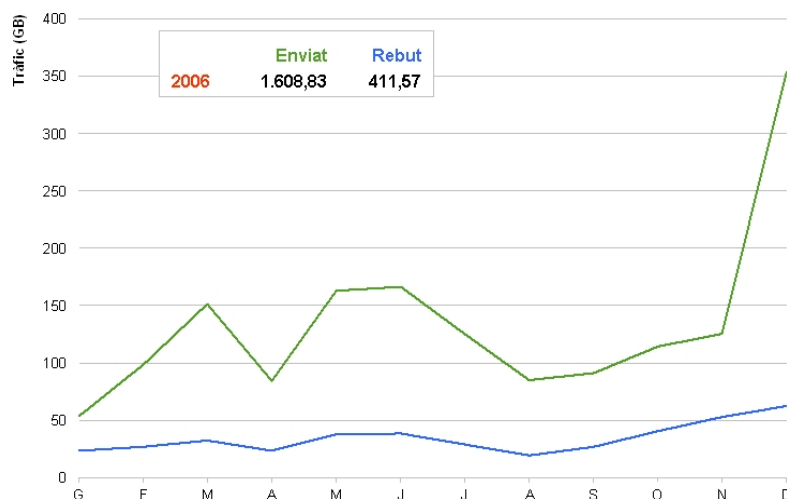


Figura 56. El Servei d'Accés Directe

4.2.5. Certificació Digital

Des de 2003 el Centre opera l'Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca (EC-UR) vinculada a la jerarquia d'entitats de certificació de les entitats públiques de Catalunya, gestionada per l'Agència Catalana de Certificació (CATCert). L'EC-UR, en la seva consideració d'Entitat de Certificació Virtual, permet a les institucions connectades a l'Anella Científica obtenir certificats digitals corporatius tant per al seu personal com per al seu maquinari i programari.

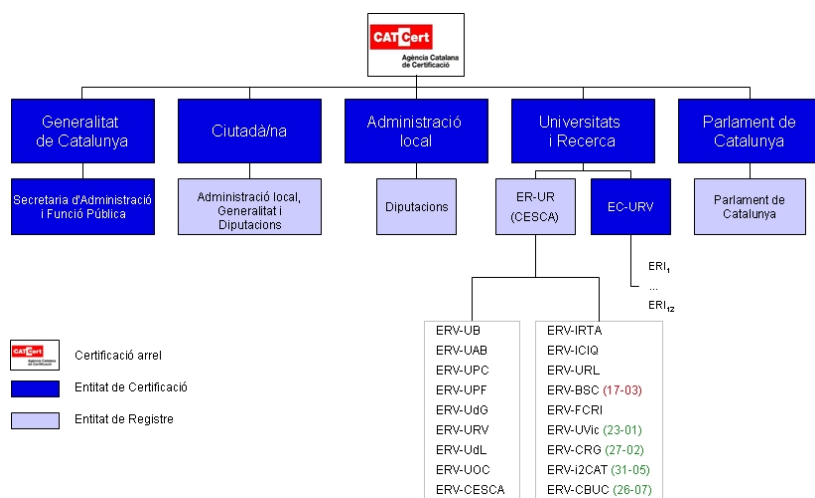


Figura 57. El model de jerarquia del Servei de Certificació Digital

Els certificats emesos per l'EC-UR garanteixen la identitat del subscriptor i del posseïdor de la clau privada, i permeten la generació de la "signatura electrònica reconeguda", és a dir, la signatura electrònica avançada que es basa en un certificat reconegut i que ha estat generada emprant un dispositiu segur. El 2006, s'han incorporat la UVic, el CRG, l'i2CAT i el CBUC com a entitats usuàries de l'EC-UR i s'ha donat la baixa el BSC-CNS.

Enguany, s'ha lliurat el primer certificat de dispositiu d'aplicació digitalment assegurada (CDA), d'utilitat per a responsables de l'operació d'aplicacions informàtiques que s'identifiquen digitalment, signen electrònicament serveis web o altres protocols i que reben documents i missatges xifrats. El 2006 s'han emès un total de 148 certificats: 138 personals, 9 de servidor i 1 d'aplicació, i se n'han revocat 25.

També s'ha col·laborat amb CATCert en l'elaboració de la *Guia de la signatura electrònica en les universitats i centres de recerca* per aportar idees sobre els procediments que podrien agilitzar-se gràcies a l'ús de la certificació digital. A curt termini, la incorporació d'aquesta tecnologia podria facilitar, sobretot, les gestions entre les institucions i l'Administració, tant a nivell estatal com autonòmic, i més endavant es podria ampliar a les gestions internes i entre institucions.

4.2.6. Veu per Internet a l'Anella

El servei de Veu per Internet a l'Anella (VIA), operatiu des de l'any 2003, permet aprofitar la infraestructura de l'Anella Científica per cursar les trucades interprovincials cap a Barcelona amb cost de trucada metropolitana o provincial. Des del 23 de març, el Campus de les Terres de l'Ebre de la URV, que s'havia connectat a l'Anella el 7 de febrer, s'ha afegit al servei.

D'altra banda, amb l'objectiu de fer un seguiment del servei VIA i debatre tant el seu futur com les opcions existents en telefonia sobre IP, durant l'any s'han organitzat dues reunions i s'ha acordat fomentar el debat de manera continuada a través d'una nova llista de distribució en la que poden participar les institucions interessades en ampliar els serveis de veu sobre IP de l'Anella.

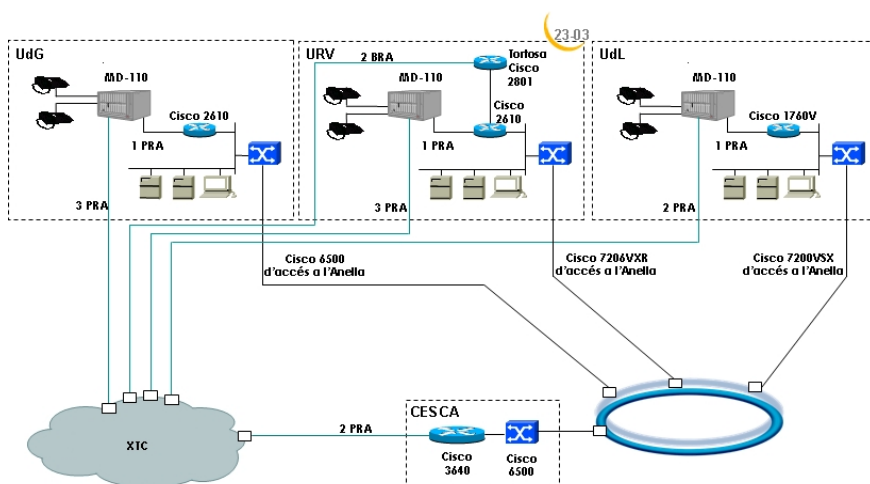


Figura 58. Veu per Internet a l'Anella

4.2.7. La cooperació tecnològica

Amb l'objectiu d'impulsar el desenvolupament de la Societat de la Informació a Catalunya i apropar els recursos a tots els membres de les universitats i de la resta d'institucions connectades a l'Anella Científica, des de 1999 s'han signat diversos convenis amb empreses d'informàtica i de comunicacions. Enguany, s'ha renovat per tres anys més l'acord per a l'adquisició de programari Microsoft amb el programa Select.

El Select redueix la despesa total i la complexitat de les compres de llicències de programari ja que, actuant totes les institucions de l'Anella com a un únic client, s'aconsegueix un descompte per volum en l'adquisició de llicències de qualsevol programari de Microsoft inclòs en els grups de productes d'aplicacions i de servidors.

4.2.8. Seguretat Informàtica

El Servei de Seguretat Informàtica (SEG) va néixer el 2003 per donar suport a les diferents institucions i respondre de manera coordinada a les diferents incidències de seguretat produïdes, com ara infeccions per codi maliciós (virus, cucs, marcadors...), atacs de denegació de servei, infraccions de drets d'autor, correu brossa, frau basat en pesca electrònica, etc. Aquest servei també porta a terme tasques proactives com ara la notificació d'alertes crítiques davant amenaces de seguretat global, amb les corresponents contramesures: recomanacions de filtres, actualització de programari, etc.

Els incidents més destacats enguany han estat els relacionats amb l'enviament de correu brossa, les infeccions per codi maliciós i els intents d'intrusió. Aquests últims es produeixen motivats per activitats delictives com per exemple la pesca electrònica. Dels intents d'intrusió, els que han estat efectius s'han portat a terme per l'existència de codis dèbils i vulnerabilitats al programari web.

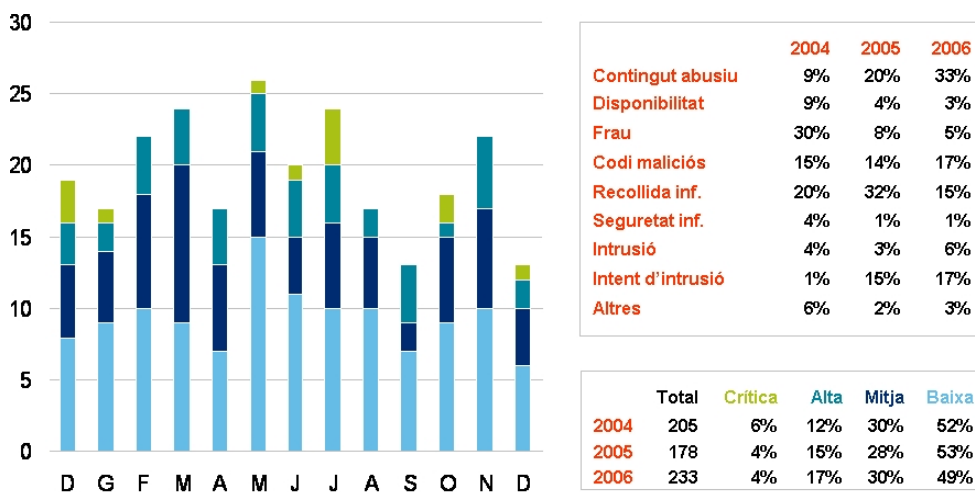


Figura 59. Incidents de seguretat

Respecte l'any 2005, l'Equip de Resposta a Incidents de l'Anella Científica (ERIAC) ha augmentat el nombre total d'incidències registrades com a conseqüència d'una participació més activa per part de les institucions de l'Anella. Cal precisar que el percentatge d'incidències de caràcter crític s'ha mantingut estable, mentre que les de caràcter alt i mitjà han augmentat lleugerament a causa especialment dels intents d'intrusió ja comentats.

Per millorar la seguretat a les institucions de l'Anella, s'ha adquirit un servidor basat en màquines virtuals integrat directament amb el troncal de la xarxa que conté un conjunt d'eines proactives i reactives per donar suport a la gestió d'incidents basades en programari lliure i amb dualitat IPv4 i IPv6. Aquestes eines permeten el monitoratge d'espai d'adreçament IPv4 i IPv6 fosc o no assignat, la contenció reactiva del tràfic mitjançant rutes de forat negre i la captura i anàlisi del tràfic en temps real sota demanda prèvia.

Per a la prevenció, detecció i resolució d'incidents és d'especial importància la participació en diferents fòrums o associacions de professionals de seguretat, que permeten disposar d'informació i contactes de primera mà en la detecció, contenció i resolució dels diferents incidents que s'hi puguin produir. Per això, s'ha continuat amb la participació en grups europeus com TF-CSIRT i internacionals com NSP-SEC. Enguany, s'ha plantejat la possibilitat d'esdevenir membres oficials del grup europeu TF-CSIRT i de l'internacional FIRST.

L'ERIAC ha continuat liderant la iniciativa anomenada "ANálisis de Actividad MALiciosa y Respuesta a IncidenteS" (ANAMARIS) a la comunitat IRIS-CERT per treballar conjuntament amb un dels grups de professionals de la seguretat de la resta d'institucions de RedIRIS en la millora de la detecció i resposta a noves amenaces.

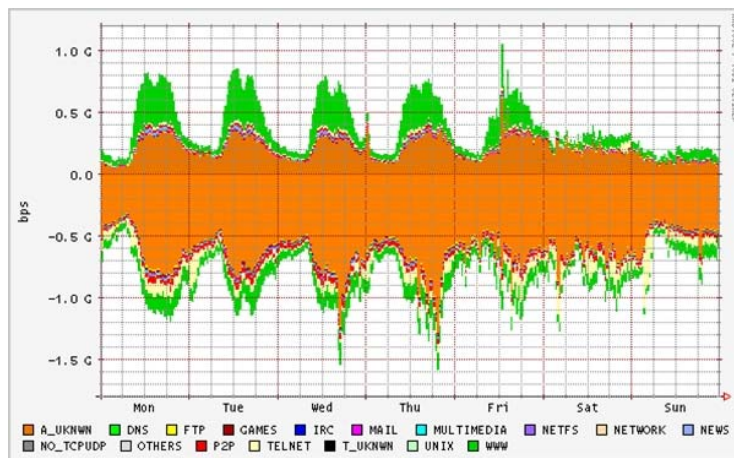
També s'han anat incrementant les funcionalitats i prestacions de la plataforma de Monitoratge i Anàlisi de Tràfic per a l'Anella Científica (SMARTxAC) per millorar la detecció de situacions anòmales i proporcionar informació històrica i detallada per punts d'accés, d'utilitat per al personal d'operació de les diferents institucions i per al propi CESCA com a gestor de l'Anella. Enguany, els usuaris poden accedir a la plataforma autenticant-se mitjançant certificats digitals.

Fins ara, l'SMARTxAC només monitorava el tràfic entre l'Anella i RedIRIS, però aquest any s'ha estudiat l'ampliació de la plataforma a nous punts de captura, com el tràfic del CATNIX o el de l'enllaç amb la internet comercial.

La figura mostra el monitoratge del tràfic en la plataforma SMARTxAC corresponent a una setmana d'intercanvi entre l'Anella Científica i RedIRIS. Com es pot apreciar a la figura 60, hi ha més tràfic enviat que rebut, a més d'un alt percentatge del tràfic desconegut², ja que la seva classificació es fa sense inspeccionar el contingut dels paquets, només comparant els ports comuns d'aplicacions amb les capçaleres. A la part inferior es poden apreciar algunes transferències massives d'informació i algun atac de denegació de servei de sortida. El tràfic vermell, que

² El tràfic desconegut apareix a la figura com A-UKNWN.

correspon al tipus P2P, és continu durant la setmana. En groc trobem una sèrie d'atacs dirigits a diferents servidors SSH d'institucions de l'Anella.



Nota: El tràfic en positiu correspon al rebut des de RedIRIS, i en negatiu, a l'enviat

Figura 60. Monitoratge del tràfic en la plataforma SMARTxAC

A més de l'SMARTxAC, les institucions de l'Anella disposen d'una eina de detecció d'intrusions basada en el maquinari Cisco IDS/IPS que permet monitorar, amb tècniques d'inspecció de continguts, alguns dels recursos crítics del CESCA i de les institucions de l'Anella.

Pel que fa a la política de seguretat, enguany s'ha iniciat la fase d'adequació d'aquesta al funcionament intern del Centre i als seus serveis. També s'ha continuat donant suport a les institucions en l'adquisició de maquinari i programari de seguretat, especialment en la seva configuració segura, orientant també en la seva arquitectura de seguretat, especialment la de perímetre. Aquesta tasca implica tant la reorganització de les diferents xarxes com la millora de la protecció i detecció als sistemes d'informació sota els criteris de les seves normatives.

4.2.9. Eduroam

Eduroam (Educational Roaming) és una iniciativa de Terena que facilita la mobilitat dels investigadors i dels estudiants europeus, ja que els ofereix connectivitat en els seus desplaçaments a la resta d'institucions que ofereixen aquest servei. D'aquesta manera, els usuaris de les institucions que participen a Eduroam tenen accés a internet a través de les xarxes, majoritàriament sense fil, de la resta d'institucions integrades al projecte.

Després de la seva posada en marxa el 2005, el servei d'Eduroam ha continuat creixent. Així, enguany s'han incorporat a aquesta iniciativa internacional el Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya (CTTC), la UAB, la UVic, l'XTEC, la UPC i el BSC-CNS. Catalunya és la comunitat autònoma amb més participants, 12 institucions de l'Anella, mentre que a la resta de l'Estat hi trobem una quarantena. En total, unes 500 institucions d'arreu del món ja participen en la iniciativa.

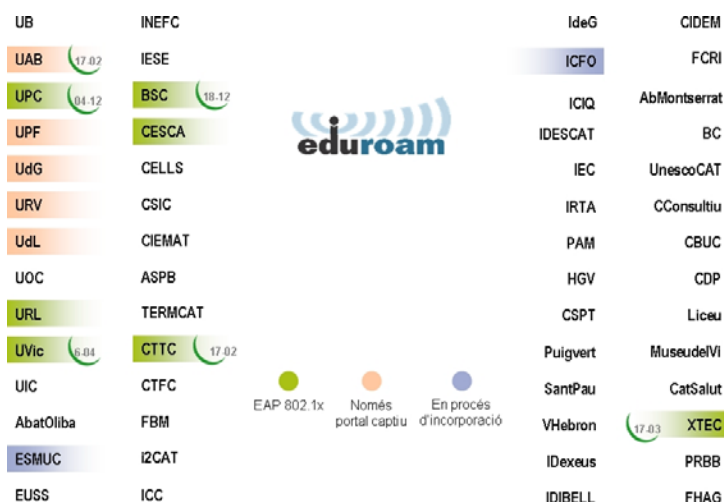


Figura 61. Institucions participants a Eduroam

Eduroam és una infraestructura basada en servidors RADIUS que principalment utilitza la tecnologia 802.1x per facilitar la mobilitat entre institucions. Les institucions que en formen part permeten l'accés a les seves xarxes als usuaris visitants que pertanyen a altres institucions participants.

El principal avantatge pels usuaris és que s'hi connecten utilitzant les mateixes credencials (nom d'usuari i contrasenya) que fan servir a la seva institució d'origen i, a més, la configuració des del seu punt de vista és la mateixa a qualsevol indret. És a dir, un cop l'usuari es pot autenticar a la seva institució d'origen, pot fer-ho de la mateixa manera allà on Eduroam estigui disponible.

La iniciativa Eduroam, que va començar l'any 2003, ha culminat amb l'establiment d'una confederació europea formada per totes les xarxes de recerca i educació nacionals (NREN) i institucions participants. Hi ha 29 països participants a Europa i 5 a la regió Àsia-Pacífic. L'objectiu de la confederació és incrementar la cobertura d'Eduroam a les xarxes d'universitats i recerca europees i de la regió Àsia-Pacífic, i establir-lo com un servei a llarg termini que no només es mantingui sinó que segueixi desenvolupant-se.

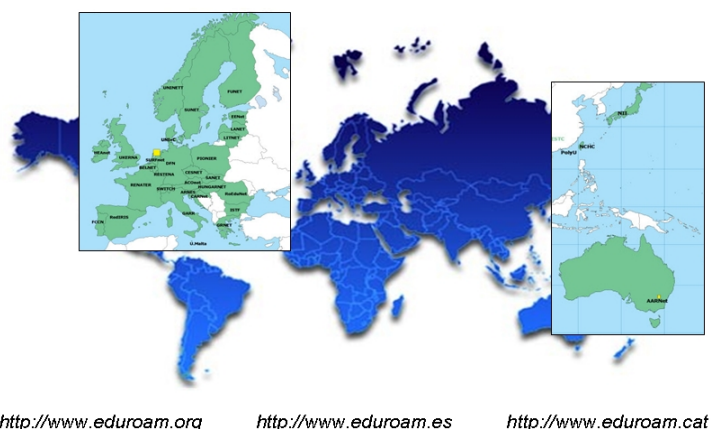


Figura 62. El desplegament internacional d'Eduroam

El mes d'octubre va començar la transició definitiva d'aquesta iniciativa cap a servei en producció, que haurà d'estar enllestit l'abril de 2007. El mes de novembre, Terena va distribuir el text de la política europea a la confederació Eduroam, que conté les normes i la descripció de les estructures organitzatives que es requereixen per operar el servei, i que hauran de signar i comprometre's a acceptar els representants de les NREN participants.

Si bé en l'etapa inicial del projecte es va avaluar la possibilitat d'oferir accés a les xarxes mitjançant la redirecció web a través de portals captius, a mesura que s'han anat refinant les característiques del servei i que s'ha redactat la política definitiva de la confederació, s'ha conclòs que l'únic mecanisme que proporciona prou seguretat en les comunicacions és l'estàndard 802.1x. Així doncs, a partir de l'1 d'octubre del 2007, l'accés mitjançant portal captiu deixarà de ser un mecanisme vàlid.

4.3. La connectivitat de RedIRIS

L'Anella està connectada a la xarxa de recerca estatal RedIRIS, mitjançant el seu node allotjat al CESCA. A través d'aquesta s'accedeix a les xarxes de recerca de les altres comunitats autònomes, com ara l'andalusica RICA, la gallega RECETGA o la basca i2BASK; a la paneuropea Géant2 i, a través d'ella, a les internacionals més avançades de recerca, l'americana Internet2, la canadensa CA*net-4, l'asiàtica TEIN2, etc.

El 2006 ha estat l'any del desplegament de la nova infraestructura de RedIRIS, anomenada RedIRIS10, després que el mes de juliol Red.es adjudiqués el concurs a l'empresa T-Systems. Amb el pas a RedIRIS10, el nucli de la xarxa estatal augmentarà de 2,5 Gbps a 10 Gbps i els enllaços, fins ara de 100 Mbps a 2,5 Gbps, passaran a velocitats que van des dels 155 Mbps als 10 Gbps. En concret, el cabal d'interconnexió principal amb l'Anella augmentarà de 2 a 10 Gbps.

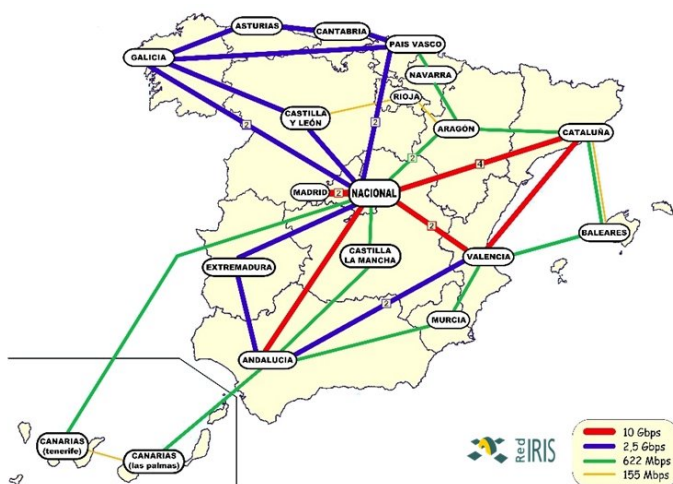


Figura 63. RedIRIS10

Per poder dur a terme aquesta renovació, el mes de setembre es va actualitzar l'equipament del node de RedIRIS allotjat al CESCA. En concret, s'ha instal·lat un commutador Nortel ERS 8010 i

s'ha substituït l'encaminador Juniper M20 per un M320. El node de RedIRIS a Catalunya estarà connectat amb cinc enllaços de 10 Gbps, dos per al tràfic regular i tres per a projectes especials.

Enguany, el cabal d'interconnexió principal de l'Anella amb RedIRIS s'ha mantingut a 2 Gbps i es disposa de tres connexions, una més que el 2005, d'1 Gbps cadascuna. D'aquestes connexions, una s'utilitza per a transmissions amb *multicast* IPv6 i VLAN dedicades a projectes, una altra per canalitzar el tràfic del projecte DEISA del BSC-CNS i la darrera pel projecte LHC Computing Grid (LCG) del Port d'Informació Científica (PIC).

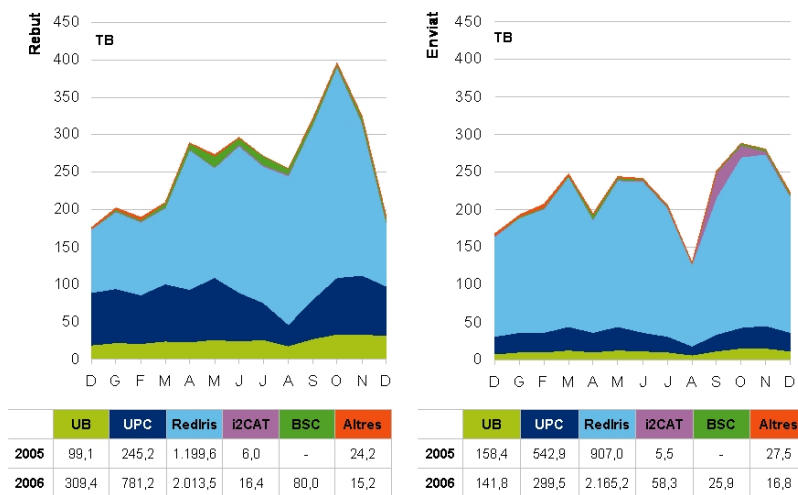


Figura 64. Estadístiques de les connexions locals

El 2006 s'ha exportat més informació que la que s'ha rebut (figura 64). Aquest fet és conseqüència de les grans transferències d'informació realitzades pel PIC i el BSC-CNS per als projectes DEISA i LHC.

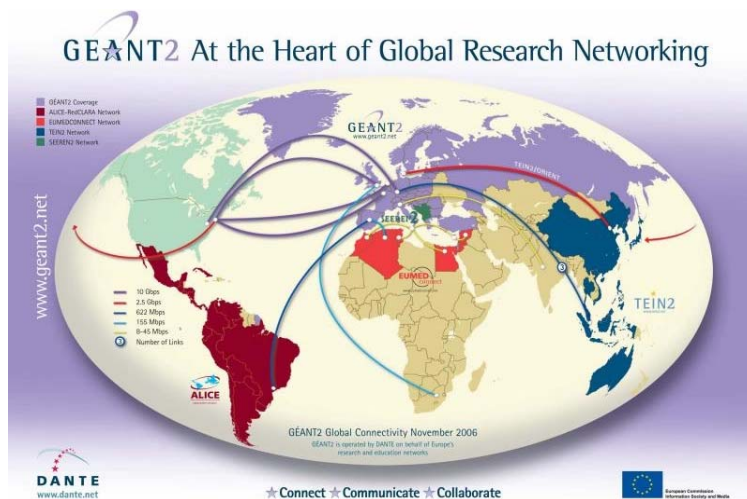


Figura 65. Géant2, connectivitat global

Pel que fa a la xarxa de recerca paneuropea Géant (figura 65), s'ha continuat amb la posada en operació de Géant2 que es va iniciar el juny de 2005 i que ja es troba quasi desplegada. Amb

Géant2, el node espanyol disposa d'un enllaç entre Madrid i Portugal i d'un altre de fibra fosca entre Madrid i Ginebra. A més, Espanya disposa de tres enllaços més a 10 Gbps, dos que connecten Madrid amb París i un darrer amb Milà.

4.4. El Punt Neutre d'Internet a Catalunya

El Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) va néixer el 1999 per interconnectar operadors de telecomunicacions, proveïdors d'internet i la comunitat científica catalana. L'objectiu és encaminar localment el tràfic d'internet de manera que el usuaris finals rebin un millor servei en reduir el camí que la informació ha de recórrer des que es demana fins que es rep.



Figura 66. El Punt Neutre d'Internet a Catalunya

A la fi de 2006, el CATNIX comptava amb 19 entitats connectades (figura 66). Durant aquest any, Iberbanda ha ampliat la seva velocitat de connexió dos cops, de 4 a 8 Mbps i de 8 a 16 Mbps, i dos operadors s'han donat de baixa, Kaos Redes IP i KPG Communications, el febrer i el desembre, respectivament.

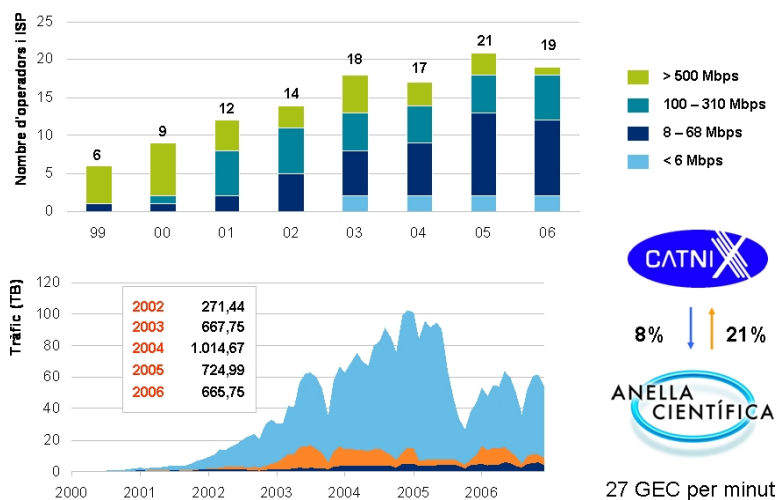


Figura 67. L'evolució del CATNIX

El tràfic intercanviat al punt neutre ha disminuït un 8,2% a conseqüència del canvi de política d'intercanvi d'alguns dels operadors i per les baixes abans esmentades, i ha passat de 725 a 666 TB. Aquesta xifra és equivalent a transferir 13 vegades per minut tot el text d'una Gran Enciclopèdia Catalana (figura 67).

Fruit dels canvis mencionats, la Comissió Tècnica del CATNIX ha estudiat revisar tant la política fundacional d'intercanvi de tràfic com els requisits d'entrada al CATNIX per permetre, d'una banda, la connexió de proveïdors de continguts i, de l'altra, que hi hagi una major flexibilitat a l'hora d'establir intercanvis entre entitats. Ambdós temes estan pendents d'ésser debats i resolts per la Comissió Executiva del CATNIX.

A més, el mes d'abril es van ampliar els mecanismes de seguretat dels commutadors del CATNIX amb la incorporació de nous filtres que permeten protegir millor la infraestructura del punt neutre.

4.4.1. El servei de veu sobre IP

Enguany s'ha adquirit el maquinari i programari necessari per posar en marxa una plataforma de veu sobre IP al CATNIX. Aquesta plataforma s'ha construït sobre una infraestructura física separada de la infraestructura de dades i utilitza només programari lliure i de codi obert, específicament adaptat per al punt neutre per la Fundació i2CAT, que també n'ha desenvolupat noves eines de gestió i monitoratge (figura 68).

La plataforma va començar com un projecte de la Fundació i2CAT amb la participació del CESCA i alguns dels membres del punt neutre, entre d'altres. Donat que les característiques d'aquesta iniciativa requereixen d'una infraestructura pròpia separada de l'actual de dades, la Comissió Tècnica del CATNIX ha avaluat la necessitat de crear una nova comissió que faci el seguiment tècnic. A més, l'explotació de la plataforma implica l'elaboració d'uns requisits administratius i tècnics propis i d'un nou model de negoci.

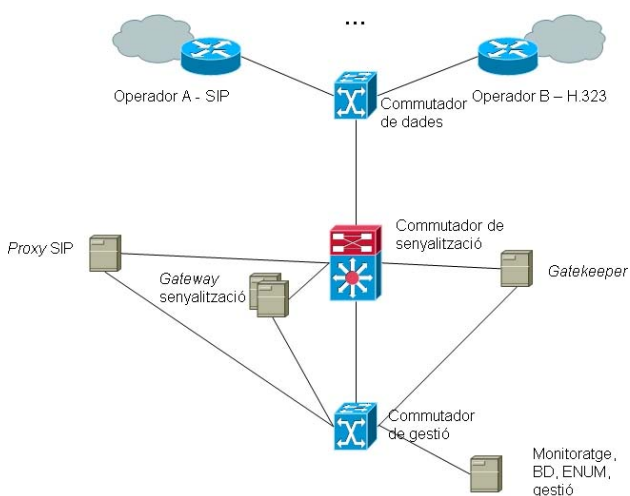


Figura 68. El servei de VoIP: topologia actual

La principal diferència amb altres plataformes de veu sobre IP és que no només permet les comunicacions entre operadors que utilitzen la mateixa tecnologia, sinó també entre els que n'usen de diferents, ja que tradueix el senyal entre els protocols SIP i H.323.

El mes de desembre es va iniciar la fase de proves amb el creuament de trucades entre Al-Pi i VozTelecom. Un cop enllestida aquesta fase, la plataforma té previst obrir-se a la resta de membres del CATNIX i d'altres ISP el primer semestre de 2007.

4.4.2. Els serveis addicionals del CATNIX

A més de la infraestructura necessària per permetre l'intercanvi de tràfic a nivell local, els membres del CATNIX tenen al seu abast una sèrie de serveis de valor afegit: el *multicast*, principalment utilitzat per fer retransmissions multimèdia; el servidor NTP, per sincronitzar els servidors amb un de proper i fiable; el servidor IXP-Watch, per garantir la integritat del tràfic dins del punt neutre; el servidor de prefixos *bogon*, per tenir constantment actualitzada la llista de xarxes no encaminables; el servidor arrel de noms F, per millorar el temps de resposta de les consultes al DNS; el Looking Glass, per a la consulta interactiva de les xarxes encaminables; la gestió fora de banda, per permetre la connexió remota als equips, etc.

A continuació, es descriuen aquests serveis de valor afegit amb més detall:

a) *Multicast*

L'any 2000 el CESCA va iniciar una experiència pilot de *multicast* a la infraestructura del CATNIX en què van participar algunes entitats. Ara, els membres que ho sol·licitin poden participar en una VLAN separada per a l'intercanvi de tràfic *multicast*, tant IPv4 com IPv6.

b) IPv6

La infraestructura del punt neutre permet l'intercanvi de tràfic IPv6. BT Telecomunicaciones va començar a intercanviar aquest tràfic el mes de juny. Altres, com Al-Pi Telecomunicacions, l'Anella, RedIRIS o Iporium Networks ja van començar a intercanviar-lo el 2005.

c) Servidor NTP

Els membres del CATNIX disposen des de l'any 2004 d'un servidor de temps NTP stratum 1, basat en programari lliure, amb el qual poden sincronitzar els seus equips. Aquest servidor, un LANTime/GPS/AHS de Meinberg, té una targeta GPS interna per sincronitzar-se simultàniament amb els satèl·lits amb els quals té visibilitat en cada moment.

d) Servidor IXP-Watch

Des del 2003, el CATNIX disposa del servidor IXP-Watch, creat inicialment per Rob Lister, del LINX, i dissenyat per monitorar a nivell 2 i detectar el tràfic potencialment perillós per al

bon funcionament del punt neutre (tràfic de *broadcast*, tràfic no IP...) A més, gràcies a aquest servidor, es pot conèixer la puresa del tràfic dins del CATNIX i identificar possibles patrons de tràfic estranys, normalment a causa de la configuració incorrecta d'algun dels participants.

e) Looking Glass

El Looking Glass, que està en funcionament des de la creació del CATNIX l'any 1999, s'usa per a la consulta interactiva d'alguns dels encaminadors i és molt útil per al seguiment de problemes d'encaminament. El mes de març es va actualitzar amb la instal·lació d'un nou encaminador que permet l'intercanvi de tràfic amb els operadors que ho desitgin i alhora comprova la visibilitat de les seves xarxes.

f) Gestió fora de banda

Per tal de poder accedir als equips sense utilitzar les interfícies habituals, existeix un encaminador per a l'accés fora de banda a disposició dels membres del CATNIX des de l'any 2002. Aquest servei és especialment útil en cas de problemes a la xarxa o al mateix encaminador de l'entitat, ja que permet fer un primer diagnòstic ràpid del problema. L'accés es fa de manera segura, únicament amb SSH i limitat per IP.

4.5. Altres activitats en Comunicacions

El 2006 s'ha renovat la infraestructura tècnica del Centre amb l'ampliació del grup electrogen de 165 kVA a 450 kVA. Aquest equip s'encarrega de donar corrent al maquinari en cas de fallada de la xarxa elèctrica. Està constituït per un motor dièsel d'última generació proveït d'un sistema electrònic de control de la injecció i un dipòsit de combustible de 750 litres que li atorguen una potència màxima en servei d'emergència de 360 kW. Aquesta renovació ha dotat al Centre de més fiabilitat i autonomia.



Figura 69. Imatge del grup electrogen

El Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS), operatiu des de l'any 1997, permet, d'una banda, allotjar equipament informàtic de les institucions adherides a l'Anella Científica, proporcionant-los-hi continuïtat elèctrica garantida i excel·lent connectivitat a l'Anella i, d'altra banda, hostatjar en el maquinari propi informació d'una tercera institució, generalment webs, però també dominis, llistes de distribució i adreces de correu electrònic. Així, s'assegura la disponibilitat dels continguts digitals científics o universitaris amb independència del cabal de connexió a l'Anella del seu propietari. Enguany, el SAHS ha experimentat 12 noves incorporacions (5 allotjaments i 7 hostatges) i 3 baixes (1 allotjament i 2 hostatges). En total, hi ha 16 servidors allotjats i 48 hostatjats.

Els nous servidors allotjats són un del Consorci de Transferència del Coneixement, un de la Farga i tres del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya. Els hostatjats són el web de FesInternet, un domini del Centre de Terminologia del Català, tres dominis del Centre Unesco de Catalunya, un domini del Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya i un domini del CBUC. Les baixes han estat un dels servidors allotjats del projecte Nodat i dos hostatges dels dominis de l'Institut Català de Nanotecnologia.

El departament també ha participat en el grup de treball Panel of Experts on Arts, Culture and Humanities E-Support (PEACHES) de Terena, que s'encarrega d'avaluar els requeriments de xarxa, rendiment i tècnics específics per a les representacions artístiques o culturals que facin ús de la xarxa. Un dels seus objectius és la creació d'un portal per difondre aquestes activitats a nivell internacional.

A més, ha col·laborat en l'elaboració del llibre *Terminologia del comerç electrònic* i dels tríptics *Seguretat a la xarxa* i *Màrqueting electrònic* del Centre de Terminologia del Català (Termcat), del qual el CESCA n'és assessor de terminologia en l'àrea de tecnologia.

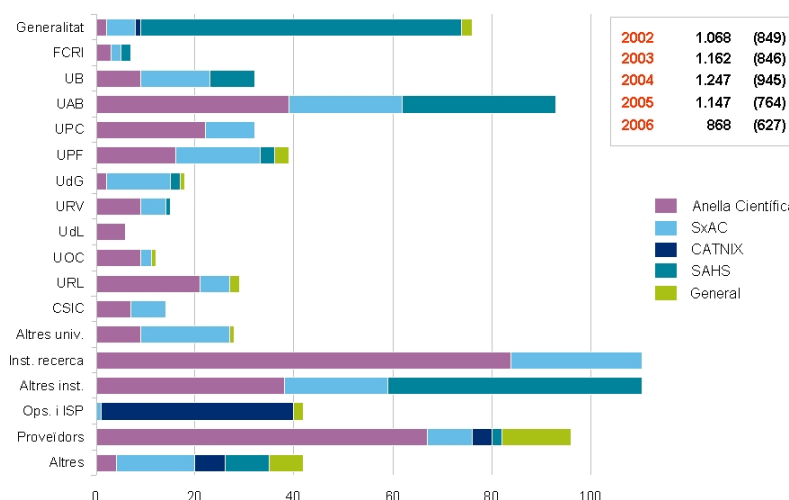


Figura 70. Les consultes de Comunicacions

El 2006 s'han rebut 868 consultes (figura 70), de les quals 627 han requerit d'algun tipus d'acció. La major part de les consultes han estat relacionades amb el correu electrònic i les llistes de distribució (12%), les noves connexions de l'Anella (8%) i l'allotjament i hostatge de webs (8%).

5. La promoció

La promoció té com a finalitat, d'una banda, proporcionar formació en les noves tecnologies i en els serveis del Centre i, de l'altra, difondre els beneficis que reporten per al progrés del país a través del *Teraflop* i d'altres mitjans de comunicació. Les seccions següents descriuen les activitats que s'han realitzat en aquestes àrees.

A la taula següent es presenta l'evolució dels indicadors de Promoció:

Indicadors de Promoció	2002	2003	2004	2005	2006
Conferències	21	14	14	12	29
Cursos Aula (assistents)	1 (19)	3 (92)	3 (90)	4 (94)	1 (10)
Jornades i seminaris (assistents)	6 (345)	5 (394)	3 (288)	9 (409)	9 (497)
Visites al Centre (visitants)	16 (318)	8 (183)	10 (277)	7 (235)	9 (191)
Notes de premsa	7	17	7	12	5
Novetats al web	82	64	89	107	123
Pàgines llegides al web (x10 ³)	699,93	737,90	705,53	812,59	1.183,68

5.1. La formació

La Trobada de l'Anella Científica (TAC) ha celebrat el 2006 la seva desena edició. La TAC'06 va tenir lloc el 14 de juny a la Universitat de Barcelona (UB), amb el títol "Nous horitzons en les comunicacions".

09.30 Benvinguda

Màrius Rubiralta, rector de la UB
Enric Banda, director de IFCRI
Joan Manuel del Pozo, conseller d'Educació i Universitats

10.00 Mapa digital para las tecnologías de comunicación:

WIMAX y su evolución
Carlos F. Bader, CTTC

10.25 Cómo convertir la WAN en LAN

(Experiencia de la UV con la fibra oscura)
Rogelio Montañana, UV

10.50 Evolució de les xarxes Wi-Fi. Cap a un entorn centralitzat

Lluís Planas, Satec

11.16 Presentació de les noves institucions adherides

11.30 Descans

12.00 Taula rodona Integració de noves funcionalitats a la xarxa

Ponents Gonçal Bonhome, AI-Pi Susana del Pozo, Soluziona
Xavier Salrà, HP Ismael Cerdà, HGV
Joan Guanyabens, UDIAT José Antonio Tébar, UPCnet
Moderador Jaume Arona, UB

13.50 Cloenda

Miquel Huguet, CESCA



Universitat de Barcelona
14 de juny de 2006

Assistents: 105

Comitè de programa:

Martí Griera (UAB)
Didac López (UdG)
Marc Vives (UPF)
Caterina Parals (CESCA)
Miquel Huguet (CESCA)

Figura 71. "Nous horitzons en les comunicacions" a la Trobada de l'Anella Científica

La TAC va comptar amb tres ponències que van tractar la tecnologia WiMAX i la seva evolució, l'experiència de la Universitat de València amb la connexió dels seus campus a 10 Gbps amb fibra fosca, i l'evolució de les xarxes Wi-Fi cap a un entorn centralitzat. A més, es va

donar la benvinguda a les nou institucions que s'han connectat a l'Anella Científica des de l'anterior edició de la TAC.

Aquesta trobada va incloure també una taula rodona, en la qual diversos representants de l'àmbit empresarial i hospitalari van debatre sobre la integració de noves funcionalitats a la xarxa. La TAC'06 va reunir 105 assistents a l'Aula Magna de la UB.

La setena edició de la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC) va tenir lloc el 9 de novembre a la Universitat de Lleida (UdL). Aquesta trobada, amb la que es va donar continuïtat al tema de l'Espai Europeu d'Ensenyament Superior (EEES) que es va iniciar en la TSIUC anterior, va dur per títol "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia".

La TSIUC va comptar amb tres ponents que van tractar el pas d'un sistema basat en la docència a un sistema basat en l'aprenentatge. Així, es va parlar de la transformació de les biblioteques universitàries cap els anomenats Learning Resources Centres, es va oferir una visió dels instruments necessaris per portar a terme el nou model educatiu que implica l'EEES, i es va explicar com la integració de les TIC i en concret la xarxa internet a la universitat ha permès configurar l'aprenentatge a distància, l'anomenat campus virtual, com un exemple d'aprenentatge continu i al llarg de la vida.

<p>10.00 Lliurament de la documentació i cafè</p> <p>10.30 Benvinguda Joan Viñas, rector de la UdL Josep Anton Ferré, Generalitat de Catalunya</p> <p>11.00 Student-Centred Support for Student-Centred Learning: From Libraries to Learning Resources Centres Terry Hanson, UK</p> <p>11.40 Confluència de servicios CRAI y ALFIN: Instrumentos para un nuevo modelo educativo Miguel Angel Marzal, U. Carlos III</p> <p>12.20 Aprender en un món en xarxa: del metacampus a la metabiblioteca Gabriel Ferraté</p> <p>13.00 Refrigeri</p> <p>15.00 Taula rodona Nou espai d'ensenyament, noves infraestructures? <i>Ponents</i> Ernest Abadal, UB Mercè Cabo, UPF Dídac López, UdG Carlos Santamaría, HP <i>Moderador</i> César Fernández, UdL</p> <p>17.00 Cloenda Miquel Huguet, CESCA</p>	 <p>Universitat de Lleida 9 de novembre de 2006</p> <p>Assistents: 102</p> <p>Comité de programa: Lluís Anglada (CBUC) Mercè Cabo (UPF) César Fernández (UdL) Antoni González (URV) Miquel Huguet (CESCA)</p>
--	--

Figura 72. "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia"

També va incloure una taula rodona on diversos representants d'universitats i del món empresarial van debatre sobre aquest nou espai d'ensenyament i els canvis i noves infraestructures que comporta, així com el rol que han de prendre les biblioteques i els serveis informàtics en aquest espai. La TSIUC va comptar amb l'assistència de 102 persones.

El 2006, amb motiu del desè aniversari del Servei de Disseny de Fàrmacs, també s'ha organitzat una trobada perquè els grups que en formen part compartissin coneixements i experiències. La jornada va tenir lloc al CESCA el 7 de novembre i hi van assistir 45 investigadors, en representació de 10 grups que participen en aquest servei.

- 9.00 Lliurament de la documentació
- 9.30 **Benvinguda**
Ernest Quingles, Ministerio de Educación y Ciencia
Xavier Testar, Generalitat de Catalunya
Miquel Huguet, CESCA
- 9.50 **Experiències en l'ús de l'SDF**
• **Directing the Whole of Modelling Repertoire Towards Understanding p38-Inhibitor Recognition**
Robert Soliva, J. Uriach i Cia
• **Limitations of Current Parameters (Enrichment, GH) for the Evaluation of Pharmacophore Screening Performance**
Rosalia Pascual, Laboratoris Dr. Esteve
• **Discovery of Bioactive Molecules from Database Search**
Amau Cordoní, UPC
- 11.30 Descans
- 12.00 **Taula rodona: Necessitats de futur en el disseny de fàrmacs**
Ponents Veronique Monjardet, Tripos
Remy D. Hoffmann, Accelrys
Leonardo Pardo, UAB
Manel López, Almirall Prodesfarma
Moderador Jordi Quintana, Laboratoris Dr. Esteve
- 13.50 **Cloenda**
Enric Banda, FCRI



Assistents: 45

Comitè de programa:
Modesto Orozco (UB)
Robert Soliva (J. Uriach i Cia.)
Miquel Huguet (CESCA)

Figura 73. “10 anys del Servei de Disseny de Fàrmacs”

La trobada “10 anys del Servei de Disseny de Fàrmacs” va comptar també amb una taula rodona per debatre les necessitats de futur en el disseny de fàrmacs i en la qual van participar usuaris tant de l'àmbit acadèmic com dels laboratoris farmacèutics i representants de les empreses que proveeixen programari a l'SDF, Accelrys i Tripos.

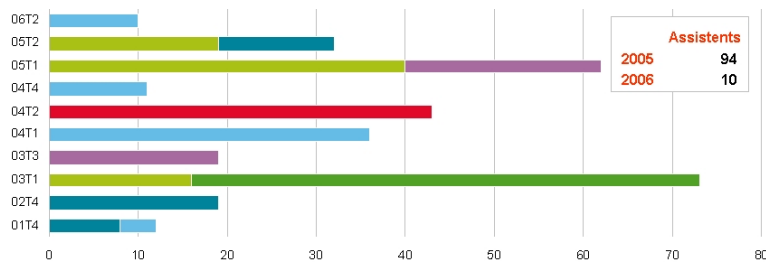
A més de les tres jornades, s'han realitzat sis seminaris. S'ha dut a terme el “CCP4-MAX INF Workshop on Phasing and Refinement”, que s'ha centrat en la resolució i el refinament d'estructures macromoleculares de cristalls, fent una introducció general als mètodes computacionals actuals. Aquest seminari ha tingut 60 assistents.

S'ha tornat a col·laborar amb Gaussian, com s'havia fet l'any 2000, per organitzar el seminari “Introduction to Gaussian: Theory and Practice”, que ha comptat amb la participació de 46 alumnes. També s'ha organitzat el seminari sobre seguretat “The Open Web Application Security Project (OWASP)”, al qual han assistit 75 persones.

Per al Servei de Disseny de Fàrmacs, s'han organitzat dos seminaris. D'una banda, amb Chemical Computing Group s'ha organitzat el seminari “MOE Trainig Session”, per presentar les aplicacions disponibles al programari Molecular Operating Environment (MOE). Aquest curs ha comptat amb 22 assistents. D'altra banda, amb Schrödinger s'ha celebrat un seminari centrat en les tècniques de descobriment de caps de sèrie basats en estructura, d'optimització basada en l'estructura i de disseny basat en el lligand. Aquest seminari ha tingut 25 alumnes.

També s'ha organitzat el seminari “Gestió de grans volums de dades”, amb la col·laboració d'HP, i en el qual el CESCA ha presentat projectes de recerca, com ara GAIA i els dipòsits d'e-informació, amb grans necessitats d'emmagatzematge, mentre que HP ha exposat les seves solucions tecnològiques per a aquests projectes. A aquest seminari hi han assistit 17 persones.

Dins l'Aula de Noves Tecnologies, s'ha organitzat el curs “Administració de sistemes SGI Altix sobre SuSE/SLES9”, impartit per SGI, i que ha comptat amb l'assistència de 10 alumnes (figura 74).



Els cursos més populars:

- Xarxes neuronals i aplicacions (65, 96T1)
- Dinàmica molecular de proteïnes i àcids nucleics (57, 03T1)
- Introducció al mètode dels elements finits (54, 95T4)
- Servei de Certificació Digital: Operativa de les Entitats de Registre Virtuals (43, 04T2)
- Dinàmica molecular i àcids nucleics (40, 05T1)
- Modelització molecular (38, 95T2)
- Serveis de certificació a Internet (38, 00T4)
- Introducció als algorismes genètics (37, 98T4)



Figura 74. Aula de Noves Tecnologies

Totes aquestes jornades, seminaris i cursos han comptat amb un total de 507 assistents. A l'annex XV es descriu la relació de la formació impartida i se'n proporciona més informació.

5.2. La difusió

Amb motiu del quinzè aniversari del CESCA, s'ha dissenyat un logotip commemoratiu i s'ha fet una nova renovació d'imatge en la portada, la capçalera i el format del *Teraflop*, així com en les transparències del Centre.



Figura 75. Evolució històrica de la revista

El primer exemplar del *Teraflop* va publicar-se el 1994 amb format A3 i a dues tintes; a l'abril de 1997, amb el número 22 i coincidint amb la publicació de la memòria d'activitats, el *Teraflop* va convertir-se en una revista a tot color de format A4. En dues ocasions més i coincidint també amb la publicació de la memòria, s'ha renovat el *Teraflop*. El març de 2004, amb el número 75, tant la imatge com la capçalera de la coberta van passar a tacar tot el paper. Dos anys després, el març de 2006, imatge i capçalera s'han integrat a la coberta (figura 75).

Enguany s'ha renovat el disseny de les transparències, que es va fer amb motiu del desè aniversari del Centre. El 2001 es va incloure a les transparències una manxeta amb els serveis del CESCA, que s'ha actualitzat cada any amb el nou maquinari instal·lat. El 2006, però, s'ha actualitzat el disseny i s'ha eliminat aquesta manxeta. Així, es disposa de més espai a la transparència per a informació i s'evita la ràpida obsolescència tecnològica de la manxeta.

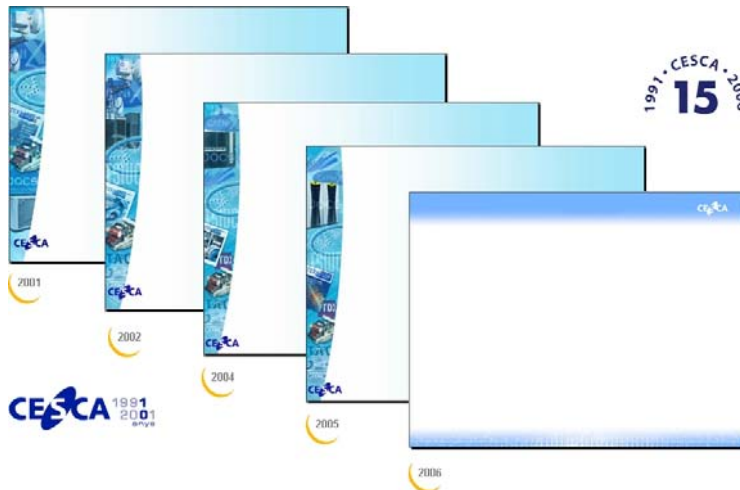


Figura 76. Renovació del disseny de les transparències

També s'ha renovat la imatge del web del CESCA i, per al Servei de Disseny de Fàrmacs, s'ha dissenyat un doble logotip, un per al propi servei (figura 20) i l'altre per a la celebració del seu desè aniversari (figura 73).

Per seguir difonent les novetats del Centre i dels seus serveis, d'una banda s'han publicat cinc *Teraflop* i, de l'altra, s'han continuat difonent a través dels webs corporatius, des de l'apartat de Novetats o des de la pròpia portada. A més, s'han continuat actualitzant les novetats del CATNIX i del TDX i s'ha engegat aquesta tasca per als nous dipòsits RECERCAT, RACO i PADICAT.

Per tal de potenciar la presència del CESCA als mitjans de comunicació, s'han dut a terme tres campanyes publicitàries en mitjans digitals (figura 77). Així, al març es va fer una campanya amb motiu del quinzè aniversari del Consorci. Al novembre, se'n va engegar una altra sobre el desè aniversari del Servei de Disseny de Fàrmacs en mitjans digitals en català i en castellà i, posteriorment, s'ha preparat una campanya sobre el dipòsit RACO, que ha aparegut als mitjans a principis de 2007.



Figura 77. Bàners per a la publicitat digital

La primera campanya, de l'1 al 15 de març, va aparèixer als mitjans digitals en català *Vilaweb*, *El Punt*, *Racó Català*, *Tribuna Catalana*, *Comunicació 21* i *Nació Digital*. La segona, del 6 al 20 de novembre, va publicitar l'SDF en els mateixos mitjans digitals en català, excepte el *Racó Català* que va ser substituït pel *Grec*, i els mitjans en castellà *Diario Médico*, *La Vanguardia* i *El Periódico*. La campanya per a RACO va aparèixer als mateixos mitjans que la de l'SDF, substituint únicament *Diario Médico* per *Avui* i TV3. Amb les dues primeres campanyes, el web del CESCA ha rebut 864 clics, mentre que amb la de RACO aquest portal n'ha rebut 2.327.

A més d'aquestes campanyes publicitàries, s'han enviat cinc notes de premsa als mitjans de comunicació i, en col·laboració amb la Biblioteca de Catalunya, s'han fet dues rodes de premsa per presentar els dipòsits RACO i PADICAT. Així, els mitjans han publicat diferents informacions tant sobre el quinze aniversari del CESCA i la inauguració de l'e-infraestructura, com sobre els dipòsits d'e-informació.

Concretament, el TDX ha estat notícia per la introducció de la tesi 3.000, pel seu cinquè aniversari i per la incorporació de la Universidade da Coruña, i els mitjans s'han fet ressò també de la presentació de RACO i PADICAT. Així, s'ha aparegut a mitjans com ara *La Vanguardia*, *El País*, *El Mundo*, *Barcelona TV*, *El Punt*, *l'Agència Catalana de Notícies*, *EFE*, *Europa Press*, *Canal Sur Radio*, *Vilaweb*, *La Malla*, *El Heraldo*, *Presència*, *Nació Digital*, etc.

Pel que fa al material promocional, s'ha reeditat el fulletó del CESCA i el del TDX, que ha estat lliurat als estudiants de tercer cicle a través dels vicerectors, així com un punt de llibre per als possibles usuaris del servei, difós a través de les biblioteques de les universitats participants en el TDX (figura 78).

També s'han elaborat dos nous plafons per difondre el quinze aniversari del Centre i els dipòsits d'e-informació (figura 79), i s'han fet bolígrafs per promocionar el Centre i regals institucionals: un tòtem per als treballadors amb 10 anys a l'empresa, jerseis per als 10 anys de

l'SDF, portaclips per als conferencians de les jornades i clauers per als membres dels òrgans de govern i els assessors del CESCA (figura 80).



Figura 78. Fulletons i punts de llibre



Figura 79. Nous plafons



Figura 80. Material promocional

Com cada any, s'han dedicat dues setmanes a organitzar diferents jornades de portes obertes. L'una al març, dins la iniciativa FesInternet, que impulsa la Secretaria de Telecomunicacions i Societat de la Informació amb l'objectiu de difondre els usos de la xarxa, i l'altra al novembre, dins la Setmana de la Ciència, que organitza la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació per tal d'apropar la tecnologia i els avenços científics a la població en general i, especialment, als estudiants. En total, 191 persones han visitat el Centre l'any 2006.

El nombre d'accessos a la pàgina principal del web han augmentat considerablement, passant de 118.394 a 182.663, portats a terme per 142.669 hosts diferents (figura 81). Les pàgines més visitades han estat les de novetats (29%), altres (23%), promoció (21%), comunicacions (13%) i sistemes (13%).

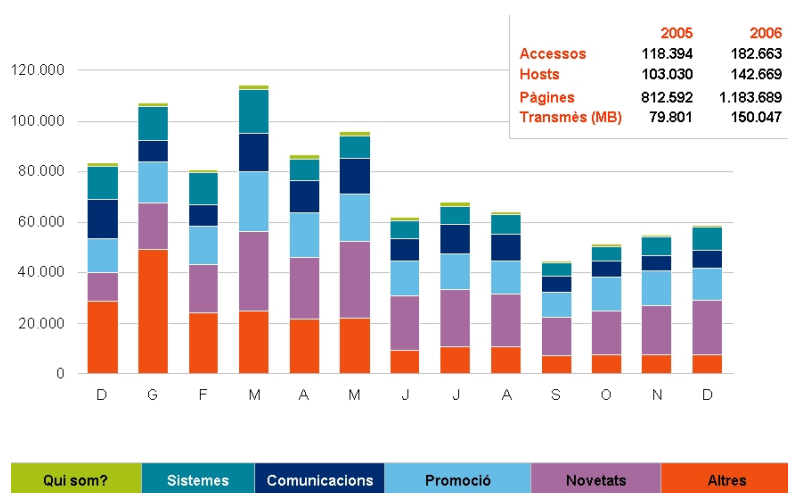


Figura 81. Els accessos al web

Al web s'han publicat 123 novetats, totes elles incloses a l'annex XIV. Les més destacades han aparegut en les onze portades del web que es troben a l'annex XIII. L'annex XII recull el sumari dels webs corporatius del CESCA (*cesca.es*, *catnix.net*, *tdx.cat*, *recercat.net* i *raco.cat*).

Per acabar, el CESCA s'ha adherit com a membre del Consell Promotor de Barcelona Ciència 2007, una iniciativa promoguda per l'Ajuntament de Barcelona i que pretén consolidar Barcelona com a ciutat de la ciència més enllà de l'any 2007 amb una agenda d'activitats adreçades a fer-ne difusió. A més, el Consorci també s'ha integrat en la Fundació BioRegió de Catalunya, que té la finalitat, entre d'altres, de consolidar Catalunya com a referent internacional amb una recerca d'excel·lència, un teixit empresarial competitiu i un sistema de transferència de coneixement sòlid i dinàmic, i contribuir al desenvolupament econòmic i social mitjançant la promoció de la biotecnologia.

Annex I

Els acrònims

Òrgans de govern i els assessors

CG	Consell de Govern
CP	Comissió Permanent
PN/E	Comissió Executiva del CATNIX
CTA	Comissió Tècnica i Assessora
PN/T	Comissió Tècnica del CATNIX
CTAC	Comissió Tècnica de l'Anella Científica
GUSDF	Grup d'Usuaris del Servei de Disseny de Fàrmacs
GUCAP	Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació
ECAS	Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Supercomputació
ECAF	Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Disseny de Fàrmacs

Sistemes

AGI ²	Accés a Gestors d'Informació per Internet
CAP	Computació d'Altes Prestacions
CAP/A	Projectes acadèmics de supercomputació
CAP/I	Projectes industrials de supercomputació
PADICAT	Patrimoni Digital de Catalunya
RACO	Revistes Catalanes amb Accés Obert
RECERCAT	Dipòsit de la Recerca de Catalunya
SDF	Servei de Disseny de Fàrmacs
SED	Servei d'Emmagatzematge de Dades
TDR	Tesis Doctorales en Red
TDX	Tesis Doctorals en Xarxa

Àrees de coneixement per als projectes de supercomputació

FI	Física
QT	Química teòrica
MM	Modelització biomolecular
CT	Ciències de la Terra
MN	Mètodes numèrics en enginyeria
IN	Informàtica
AL	Altres

Comunicacions

CATNIX	Punt Neutre d'Internet a Catalunya
EC-UR	Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca
ERIAC	Equip de Resposta a Incidents de l'Anella Científica
ER-UR	Entitat de Registre d'Universitats i Recerca
ERV	Entitat de Registre Virtual
S24x7	Servei de manteniment 24 hores, 7 dies a la setmana
SAD	Servei d'Accés Directe
SAHS	Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors
SAR	Servei d'Accés Remot
SAV	Servei de Videoconferència
SCD	Servei de Certificació Digital
SEG	Servei de Seguretat Informàtica
SxAC	Serveis addicionals de l'Anella Científica
VIA	Servei de Veu per Internet a l'Anella

Promoció

ANT	Aula de Noves Tecnologies
JOCS	Jornada Catalana de Supercomputació
TAC	Trobada de l'Anella Científica
TSIUC	Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya

Annex II

Els òrgans de govern i els assessors

Aquest annex descriu la composició dels tres òrgans de govern del CESCA (Consell de Govern, Comissió Permanent i Comissió Executiva del CATNIX), i els set òrgans assessors (CTA, CTAC, GUSCF, GUCAP, ECAS, ECAF i Comissió Tècnica del CATNIX)

1. Consell de Govern

D'acord amb els Estatuts del CESCA, al Consell de Govern li correspon la representació, la direcció i l'administració del Consorci. Està format per:

President

Rafael Español i Navarro President, Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació

Vicepresident

Josep Huguet i Biosca Conseller d'Innovació, Universitats i Empresa

fins al 28-11: Joan Manuel del Pozo i Àlvarez Conseller d'Educació i Universitats

fins al 11-05: Manel Balcells i Díaz

fins al 20-04: Carles Solà i Ferrando Conseller d'Universitats, Recerca i Societat de la Inf.

Secretari

Enric Banda i Tarradellas Director, Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació

Vocals

Francesc Xavier Hernández i Cardona Director general de Recerca

fins al 05-12: Xavier Testar i Ymbert

fins al 30-05: Francesc Xavier Hernández i Cardona

Josep Anton Ferré i Vidal Director general d'Universitats

fins al 02-05: Ramon Vilaseca i Alavedra

Jordi Bosch i Garcia Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Inf.

fins al 30-11: Marta Continente i Gonzalo

fins al 23-05: Jordi Marín i Puigpelat

fins al 02-05: Oriol Ferran i Riera

Joan Pau Clar i Guevara Subdirector general de Política Industrial

Carles Arias i Casal Director de Serveis, Dept. de Salut

fins al 05-12: Lluís Torrens i Mèlich

Màrius Rubiralta i Alcañiz Rector, Universitat de Barcelona

Lluís Ferrer i Caubet Rector, Universitat Autònoma de Barcelona

Antoni Giró i Roca Rector, Universitat Politècnica de Catalunya

fins al 29-03: Josep Ferrer i Llop

Josep Joan Moreso i Mateos Rector, Universitat Pompeu Fabra

Anna M. Geli de Ciurana
Francesc Xavier Grau i Vidal
fins al 23-05: Lluís Arola i Ferrer
Joan Viñas i Salas
Imma Tubella i Casadevall
Esther Giménez-Salinas i Colomer
Lluís Calvo i Calvo

Rectora, Universitat de Girona
Rector, Universitat Rovira i Virgili
Rector, Universitat de Lleida
Rectora, Universitat Oberta de Catalunya
Rectora, Universitat Ramon Llull
Coordinador Institucional a Catalunya, CSIC

2. Comissió Permanent

La Comissió Permanent va ésser creada pel Consell de Govern l'any 1997 i la seva composició actual és la següent:

President

Francesc Xavier Hernández i Cardona Director general de Recerca
fins al 05-12: Xavier Testar i Ymbert
fins al 23-05: Jordi Marín i Puigpelat
fins al 02-05: Oriol Ferran i Riera

Vicepresident

Enric Banda i Tarradellas Director, Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació

Secretari

Miquel Huguet i Vilella Director, CESCA

Vocals

Marçal Pastor i Anglada Vicerector de Recerca, UB
Jordi Marquet i Cortés Vicerector de Projectes Estratègics, UAB
Carles Ramió i Matas Vicerector de Planificació i Avaluació, UPF
Joaquim Majó i Fernández Vicerector de Desenv. Tec. i Gestió del Coneixement, UdG
Josep Pallarès i Marzal Vicerector de Transferència i Innovació, URV
fins al 23-05: Antoni González i Sanmartí

Vocals suplents

Josep Casanovas i García Vicerector de Política Universitària, UPC
César Fernández i Camón Vicerector d'Infraestructures i TI, UdL
Llorenç Valverde i Garcia Vicerector de Tecnologia, UOC
Josep M. Garrell i Guiu Vicerector de Recerca i Tecnologia, URL

3. Comissió Executiva del CATNIX

La Comissió Executiva del CATNIX va ésser creada l'any 1999, en posar en operació aquest servei, per prendre totes les decisions que afectin el seu funcionament. La seva composició és la següent:

President

Jordi Bosch i Garcia	Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Inf.
fins al 30-11: Marta Continente i Gonzalo	
fins al 23-05: Jordi Marín i Puigpelat	
fins al 02-05: Oriol Ferran i Riera	

Vicepresident

Joan Pau Clar i Guevara	Subdirector general de Política Industrial
-------------------------	--

Vocals

Enric Banda i Tarradellas	Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació
Gonçal Bonhomme i Altable	Al-Pi Telecomunicacions
Roberto Beitia Bastida	Sarenet
Carlos Alonso-Pérez Ortega	Ono
Juan José Candalija Rebollo	BT España
Tomàs Domínguez i Balcells	Jazztel
Enric Martín i Planell	Vodafone
Ramón Santocildes i Castañón	Colt Telecom Barcelona
Julio de Mora Sánchez	Easynet España
Jesús Manuel Ruiz Casal	Telefónica Empresas España
Joan Ventura i Cardona	Adam Internet
Jordi Martín i Guart	Acens Technologies, S.A.
fins al 01-01: Faustino Jiménez Carracedo	
Alberto Pérez Gómez	Red.es
Jordi Mas i Rolland	Nexica
Isabel Torras i Espinalt	Altecom
Juan José Toribio i Moreno	KAOS Redes IP (fins al 29-12)
Maria Jesús Martínez i Esteva	KPG Communications (fins al 09-02)
Ginés Alarcón i Martínez	T-Systems ITC Services Iberia
Jordi Compte i Batista	Flash10 (fins al 11-01)
Javier León Núñez	Iberbanda
Félix Izquierdo García	Iporium Networks
fins al 15-02: Joan Dachs i Porta	
Carlos Antolínez Villaverde	Ibercom

Secretari

Miquel Huguet i Vilella	CESCA
-------------------------	-------

4. Comissió Tècnica i Assessora

La Comissió Tècnica i Assessora (CTA) ha estat constituïda enguany amb dos objectius bàsics. D'una banda, assessorar als membres de la Comissió Permanent i al Director en la presa de decisions relatives als serveis del Centre i de l'altra, proposar-los temes concrets de decisió o pronunciaments sobre els quals la CTA consideri que requereixin d'una acció coordinada.

Els membres de la CTA tenen com a missió aportar la seva qualificada experiència, la visió tecnològica avançada i el coneixement de les seves respectives institucions per fer de la CTA un fòrum on es debatin les futures necessitats de serveis i accions, i on s'identifiquin les capacitats i possibilitats de coordinació dels seus consorciats.

President

Miquel Huguet i Vilella CESCA

Vocals

Joan Hernández i Basora	Universitat de Barcelona
fins al 13-11: Jaume Arona i Corominas	
Lorenzo Rodríguez i Martín	Universitat Autònoma de Barcelona
n/d	Universitat Politècnica de Catalunya
fins al 09-05: Manuel Caballero de la Torre	
Teresa Grané i Viadé	Universitat Pompeu Fabra
Dídac López i Viñas	Universitat de Girona
Lluís Alfons Ariño i Martín	Universitat Rovira i Virgili
Carles Mateu i Piñol	Universitat de Lleida
Francesc Noguera i Puig	Universitat Oberta de Catalunya
Víctor Pons i Colomer	Universitat Ramon Llull

Secretària

Caterina Parals i Colom CESCA

5. Comissió Tècnica de l'Anella Científica

La Comissió Tècnica de l'Anella Científica (CTAC) va crear-se l'any 1993, quan es va crear l'Anella Científica, per debatre tots aquells temes que afectin la xarxa de comunicacions. Està constituïda per tots els responsables de comunicacions de les universitats del Consorci i de les institucions no consorciades, però que tenen una connexió mínima de 10 Mbps amb l'Anella.

President

Miquel Huguet i Vilella CESCA

Vocals

Lluís Cuadra i Albó	Universitat de Barcelona
Martí Griera i Fisa	Universitat Autònoma de Barcelona

Jordi Collado i Calpe	UPCnet
Marc Vives i Pizà	Universitat Pompeu Fabra
Joan Fontcuberta i Solà	Universitat de Girona
Encarna Pérez i Ruíz	Universitat Rovira i Virgili
Carles Mateu i Piñol	Universitat de Lleida
Antoni Roure i Alcobé	Universitat Oberta de Catalunya
Josep Fernández i Bayó	Corporació Sanitària Parc Taulí
Víctor Pons i Colomer	Universitat Ramon Llull
Jordi Tuneu i Oliva	Universitat de Vic
Marc Guri i Casallachs	Dept. d'Educació, Generalitat de Catalunya
fins al 05-09: Jordi Orgué i Bella	
Eduard Vidal i Agell	CatSalut
Josep Solé i Altadill	Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries
Francesc Llampallas i Miró	Hospital de la Santa Creu i Sant Pau
Oriol Renter i Mateu	Fundació Centre Documentació Política
Ruben Borja i Lledós	Universitat Abat Oliba CEU
Enric Palma i Carranza	Institut Cartogràfic de Catalunya
Cèsar Latorre i Castillo	Escola Universitària Salesiana de Sarrià
Francesc Iglesias i García	Hospital Universitari Vall d'Hebron
Albert Cabeza i Lorient	CIDEM
Jordi Borrell i Font	INEFC
Manel Tristán-Polo i Sánchez	Agència de Salut Pública de Barcelona
Manel Mendoza i Flores	Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya
fins al 12-12: Jordi Cebrià i Escolà	
Jordi Javier Prat i Grau	Universitat Internacional de Catalunya
Shakira Sánchez i Marco	Institut Català d'Investigació Química
Jordi Domingo i Pascual	Fundació I2CAT
Emili Hernández i Chiva	Institut de Ciències de la Terra "Jaume Almera"
Ramon Ros i Gorné	Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya
Francesc Salvador i Carvajal	Institut d'Estudis Catalans
Miquel Pontes i García	Fundació Puigvert
Sebastià Caro i Gómez	Hospital General de Vic
Manel Gallegos i Navarro	Institut d'Estadística de Catalunya
Jordi Varela i Agrelo	Escola Superior de Música de Catalunya
Julia Osorio i Ortega	Fundació del Gran Teatre del Liceu
Manuel Marín i Blanco	Centre d'Ensenyament Santa Coloma
Karibel Pérez i Villalba	Biblioteca de Catalunya
David Fernández i Barba	Parc Astronòmic Montsec
Gonçal Badenes i Guia	Institut de Ciències Fotòniques
Carles Kishimoto i Bisbe	Barcelona Supercomputing Center
Raül Macian i Castillo	Institut de Geomàtica
Francesc Manaut i Clusella	Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona (des de 22-03)
Secretària	
Caterina Parals i Colom	CESCA

Vicepresidents

Josep M. Lluch i López
Jordi Torra i Roca

Dept. Química, UAB
Dept. Astronomia i Meteorologia, UB

Vocals

Santiago Olivella i Nel·lo
Miquel Duran i Portas
Francesc Illas i Riera
Francisco J. Luque Garriga
Mariona Sodupe i Roure
Eliseo Ruiz Sabin
Agustí Lledós i Falcó
Antonio Aguilar i Navarro
Juan José Novoa Vide
Carles Alemán i Llansó
Anna Serra i Tort
Carles Jaime i Cardiel
Carlos Frontera Beccaria
Lourdes Vega Fernández
Enrique Gaztañaga Balbás
Feliu Maseras i Cuní

IIQAB, CSIC
Institut de Química Computacional, UdG
Dept. Química Física, UB
Dept. Fisicoquímica, UB (des de 05-04)
Dept. Química, UAB
Dept. Química Física, UB (des de 05-04)
Dept. Química, UAB
Dept. Química Física, UB
Dept. Química Física, UB
Dept. Enginyeria Química, UPC (des de 05-04)
Dept. Matemàtica Aplicada III, UPC (des de 05-04)
Dept. Química, UAB (des de 05-04)
ICMAB, CSIC (des de 05-04)
ICMAB, CSIC (des de 05-04)
Dept. Astrofísica, IEEC/CSIC (des de 05-04)
ICIQ (des de 05-04)

Secretari

Joan Cambras i Pajarols

CESCA

8. Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Supercomputació

La Comissió dels Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Supercomputació (ECAS)³ creat l'any 2001, està format pel president, vicepresidents, secretari i tres vocals nomenats per la Comissió Permanent a proposta del Director, i escollits preferentment entre els membres de la GUCAP. Actua com a mesa de contractació per als concursos que es realitzen en supercomputació i, en general, com a equip d'especialistes que treballen plegats per desenvolupar idees sobre aquest tema i per proposar plans d'acció al respecte.

President

Miquel Huguet i Vilella

CESCA

Vocals

Josep M. Lluch i López
Jordi Torra i Roca

Dept. Química, UAB
Dept. Astronomia i Meteorologia, UB (des de 05-04)

³ El nom original va ésser Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Supercomputació (GTAAS).

Miquel Duran i Portas
Francesc Illas i Riera
Francisco J. Luque Garriga

Institut de Química Computacional, UdG
Dept. Química Física, UB
Dept. Fisicoquímica, UB (des de 05-04)

Secretari

Joan Cambras i Pajarols

CESCA

9. Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Disseny de Fàrmacs

La Comissió dels Experts per a la Contractació i l'Anàlisi en Disseny de Fàrmacs (ECAAF)⁴, creat l'any 2002, està format pel president, vicepresidents, secretari i dos vocals nomenats per la Comissió Permanent a proposta del Director i escollits preferentment entre els membres del GUSDF. Actua com a mesa de contractació per als concursos que es realitzen en maquinari o programari per a aquest servei i, en general, com a equip d'especialistes que treballen plegats per desenvolupar idees sobre aquest tema i per proposar plans d'acció al respecte.

President

Miquel Huguet i Vilella

CESCA

Vocals

Modesto Orozco i López
Robert Soliva i Soliva
Miquel Pons i Vallès
Manuel López i Martínez

Institut de Recerca Biomèdica, Parc Científic de BCN
Palau Pharma, S.A.
Dept. Química Orgànica, UB
Laboratorios Almirall, S.A.

Secretari

Joan Cambras i Pajarols

CESCA

10. Comissió Tècnica del CATNIX

La Comissió Tècnica del CATNIX va néixer conjuntament amb la Comissió Executiva, l'any 1999, i està constituïda per un representant tècnic de cada entitat connectada al Punt Neutre d'Internet a Catalunya, on s'analitzen i debaten els temes que afecten el seu funcionament.

President

Miquel Huguet i Vilella

CESCA

Vocals

Marcel Antràs i Puchal

Al-Pi Telecomunicacions

⁴ El nom original va ésser Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Cerca de Farmacòfors (GTAAF).

Santiago Mercado Garrido
Víctor Carbonell i San José
Juan Pedro Cerezo Martín
Félix Morgado Sánchez
Pedro Ruiz Pérez
Javier Benítez i Jiménez
Ángel Jarabo Sevilla
Javier González Vela
Alfonso Masana Mejuto
Alfons Friedl
Esther Robles Blázquez
Alfonso López i García
Josep Olivet i Torras
David Toribio i Vives
Jaume Nicolau i Riutort
Ferran Gatus i Pena
Jordi Hortigüela i Bodi
Santiago Cano Serrano
Félix Izquierdo García
fins al 15-02: José Vidaña i Moyano
David Barbarin Aramendia

Secretària

Caterina Parals i Colom

Sarenet
Ono
BT España
Jazztel Telecomunicaciones
Vodafone
Colt Telecom Barcelona
Easynet España
Telefónica de España
Adam Internet
Acens Technologies
Red.es
Nexica
Altecom
KAOS Redes IP (fins al 29-12)
KPG Communications (fins al 09-02)
T-Systems ITC Services Iberia
Flash10 (fins al 11-01)
Iberbanda
Iporium Networks

Ibercom

CESCA

Annex III

Els projectes de supercomputació de més consum

Aquest annex descriu la relació dels 30 projectes de supercomputació de més consum durant l'any 2006. Per a cada projecte s'inclou: el títol, el cap i el percentatge de consum⁵, el departament i la institució, i una breu descripció.

1. *Catàlisi per metalls de transició. Aplicacions en química ambiental i en sistemes d'interès bioquímic*

Mariona Sodupe

17,2%

Química

UAB

En aquest projecte s'estudien teòricament diversos problemes relacionats amb la catàlisi per complexos metàl·lics, d'importància en el camp de la química ambiental i de la bioquímica. En particular, els problemes en els que estem interessats són:

- La descomposició catalítica dels òxids de nitrogen (NO_x) que es produeixen en els processos de combustió i que són molt contaminants. En particular, s'està investigant el paper de les zeolites de coure Cu-ZSM5 en aquesta descomposició.
- Emmagatzematge d'hidrogen molecular en materials microporosos, de gran importància en l'ús d'hidrogen com a font d'energia alternativa. S'estan estudiant els llocs de coordinació dels cations Cu⁺ en la zeolita Cu-CHA i la seva interacció amb hidrogen molecular.
- Processos de fragmentació de pèptids induïts per cations metàl·lics o per reaccions d'oxidació. L'estudi d'aquests processos en sistemes metall-ligand i en radical cations és de gran interès per tal d'aprofundir en la comprensió de molts processos bioquímics. Igualment, el coneixement dels patrons de fragmentació pot ser de gran utilitat per interpretar els experiments d'espectrometria de masses, usats en la seqüenciació de pèptids.
- Les transferència protòniques intermoleculares en els parells de bases del DNA induïdes per la radiació ionitzant o per l'efecte de la cationització per metalls de transició. Aquestes reaccions són molt importants, ja que generen la formació de tautòmers rars, que podrien relacionar-se amb processos que originen mutacions en l'estructura del DNA.

2. *Reconeixement molecular*

Modesto Orozco

6,5%

Bioquímica i Biologia Molecular

UB

El nostre principal objectiu és l'estudi del reconeixement molecular en sistemes bioquímics. Estem interessats en les interaccions que envolten les macromolècules d'interès biològic, com pot ésser el DNA o les proteïnes. Estudiem amb especial èmfasi les interaccions que són importants des d'un punt de vista farmacològic. Les nostres eines són tant la mecànica quàntica com la clàssica. Alguns dels mètodes emprats en aquests estudis han estat desenvolupats pel nostre grup.

El suport computacional proporcionat pel CESCA ens ha permès progressar en el nostre estudi teòric de sistemes bioquímics, tant des d'un vessant de la modelització com de la bioinformàtica. Fites especialment rellevants han estat la caracterització *in silico* de diverses formes inusuals del DNA d'importància biomèdica i el desenvolupament de nous algoritmes per tractar la problemàtica de la solvació en proteïnes.

⁵ El percentatge de consum inclou també l'ocasionat pels investigadors externs, sufagrats per la Comissió Europea o el Ministerio de Educación y Ciencia, que col·laboren en el projecte.

3. *Estructura i propietats dels polímers: càlculs electrònics, simulacions atomístiques i models coarse-grained*
Carlos Alemán 6,5%
Enginyeria Química UPC

L'estructura i les propietats dels materials polimèrics es modelitzen mitjançant diferents tècniques computacionals. El projecte inclou tant l'estudi de propietats microscòpiques, per a les quals són necessàries tècniques de simulació atomístiques, com ara el desenvolupament de models mesoscòpics per investigar fenòmens de llarg abast.

Els recursos de supercomputació del CESCA ens han permès dur a terme diversos estudis relacionats amb l'estructura i les propietats dels materials polimèrics. En particular, destaquen els nostres desenvolupaments metodològics en l'estudi de les propietats físiques, com ara els coeficients de solubilitat i de difusió i la viscositat, dels materials purs i les seves barreges. El nostre objectiu és desenvolupar nous materials amb propietats optimitzades, per a la qual cosa primer necessitem dissenyar mètodes que permetin predir les propietats de polímers en estat sòlid.

4. *Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició*
Agustí Lledós 6,1%
Química UAB

En el projecte s'apliquen els mètodes de la Química Teòrica a sistemes amb metalls de transició, tant organometàl·lics com bioinorgànics. Els càlculs es duen a terme en models el més proper possible als sistemes reals. Amb aquesta finalitat el grup ha desenvolupat la metodologia híbrida IMOMM, que combina càlculs quàntics per una part de la molècula amb càlculs de mecànica molecular per a la resta del mateix sistema. Els temes de recerca del projecte poden classificar-se en quatre grans apartats: complexos de metalls de transició amb lligands dihidrogen i polihidrurs; complexos bimetàl·lics amb lligands pontals, catàlisi asimètrica i sistemes amb metalls de transició d'interès bioquímic.

5. *Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics*
Santiago Álvarez 5,9%
Química Inorgànica UB

La recerca d'aquest grup fa servir mètodes mecano-quàntics i del funcional de la densitat per realitzar càlculs que permeten estudiar l'estructura electrònica tant de molècules com de sòlids, així com de les propietats que se'n deriven. Entre els recents resultats destaquen els estudis en les interaccions d'intercanvi entre àtoms metàl·lics en compostos polinuclears, que poden donar lloc a imants unimoleculars; en les reaccions de formació i ruptura d'enllaços sofre-sofre en sistemes potencialment biomimètics de cupredoxina i metal·lotioneïnes; en les preferències de coordinació dels metalls del grup de l'or amb una varietat de lligands, i l'establiment de les raons que afavoreixen els diversos números de coordinació que donen els compostos d'aquests metalls, i en el desenvolupament d'un mètode per aplicar les mesures contínues de simetria als núvols de densitat electrònica de molècules, en contraposició a l'aplicació habitual que té en compte tan sols les posicions dels nuclis atòmics.

6. *Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic*
Juan José Novoa 5,3%
Química Física UB

El principal objectiu del nostre projecte és establir la metodologia necessària per portar a terme el disseny de cristalls moleculars amb propietats magnètiques, conductores de l'electricitat o superconductors. Per això, estudiem les interaccions intermoleculars que es produeixen en aquests per mètodes *ab initio* i mirem com és possible fer-les més fortes i/o més direccionals.

El grup ha seguit el seu treball sobre els materials moleculars d'interès tecnològic. S'ha proposat un possible mecanisme per justificar el magnetisme trobat experimentalment en els polímers de C60, la qual cosa pot obrir la porta a l'obtenció de materials magnètics a temperatura ambient de forma més controlada que l'actual.

S'ha continuat estudiant el mecanisme d'interacció magnètica en cristalls moleculars, estenent el camp d'aplicació de la nostra metodologia a sistemes que contenen àtoms metàl·lics. Finalment, s'ha continuat amb l'estudi de la naturalesa de les interaccions que apareixen en cristalls moleculars, línia dintre de la qual s'han publicat diversos

articles on es demostra la importància de la contribució electrostàtica en aquestes interaccions i quins factors determinen el nombre de coordinació dels complexos de coure.

7. *Catàlisi enantioselectiva*

José Manuel Saà 4,1%
Química UIB

La catàlisi enantioselectiva en fase homogènia és una de les àrees més actives de la química orgànica actual, ja sigui promoguda per l'acció de complexos metàl·lics o per l'acció d'espècies estrictament orgàniques. Revelar els detalls mecànics íntims que controlen la vitalitat d'un cicle catalític és una tasca feixuga però fonamental per al seu desenvolupament. En el nostre projecte es proposa un tractament computacional de la catàlisi i de cicles catalítics d'interès.

8. *Simulació de dinàmica molecular de sistemes biomoleculars*

Xavier Daura 4,0%
Unitat de Biologia Computacional UAB

Els mètodes de simulació computacional estan esdevenint eines essencials en moltes àrees de la física, química, i bioquímica. En particular, els mètodes de simulació de dinàmica molecular proporcionen una de les bases per a l'estudi de sistemes biomoleculars a alta resolució espacial i temporal. Les línies de recerca del nostre grup cobreixen tres tònics: l'estudi dels mecanismes de plegament de pèptids (i eventualment proteïnes), l'estudi de les interaccions entre diferents tipus de macromolècules, i el càlcul d'energia lliure d'enllaç per a sistemes macromolècula-fàrmac.

9. *Catàlisi de processos químics i química supramolecular*

Feliu Maseras 3,8%
Química ICIQ

La química computacional és una eina bàsica en l'atac multidisciplinari a diferents problemes químics que es porten a terme a l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ). Entre aquests problemes tractats ocupen un lloc central la catàlisi de processos químics, tant homogènia com heterogènia, i la química supramolecular.

10. *Estructura electrònica i propietats de materials d'interès tecnològic*

Francesc Illas 3,4%
Química Física UB

Molts dels sistemes més comuns en química i en física involucren sistemes en matèria condensada, és a dir, sòlids. Per aquests sistemes qualsevol intent de descripció microscòpica rigorosa passa per l'aplicació de models més o menys complicats. Aquesta simplificació del material permet la utilització de tècniques tant de química quàntica com de física de l'estat sòlid per descriure a nivell atòmic els processos físics i químics més rellevants. El nostre objectiu és, doncs, obtenir els mecanismes físics responsables de l'aparició de propietats desitjades i així aportar informació necessària pel desenvolupament de noves tecnologies basades precisament en l'explotació d'aquestes propietats.

En els darrers anys ens hem ocupat de fenòmens de superfície i la seva relació amb catàlisis heterogènia, també de l'estructura electrònica i interaccions magnètiques de sòlids iònics amb propietats molt especials com els òxids de coure relacionats amb superconductors d'alta temperatura crítica o els òxids de manganès responsables de l'anomenada magnetoresistència gegant. Sovint els defectes puntuals doten un material de propietats específiques i per això ens ocupem també de l'estructura electrònica, estats excitats i reactivitat de defectes puntuals en òxids. Finalment, en els darrers anys s'ha estat treballant en la simulació dels processos de transferència de càrrega en entorn electroquímic incloent explícitament efectes de camp externs i de solvent.

11. *Dinàmica de reaccions químiques elementals*

Antoni Aguilar 3,3%
Química Física UB

L'objectiu del projecte és l'estudi teòric i computacional de la dinàmica de reaccions elementals, ja siguin d'interès fonamental o aplicat (per exemple, làsers químics, reaccions atmosfèriques i interestel·lars, processos de combustió, etc.). La metodologia disponible s'utilitza per a la interpretació i formulació de models a un nivell molecular d'un seguit de magnituds experimentals relacionades amb la velocitat de les reaccions i les seves característiques dinàmiques més importants. El procediment general implica la construcció de les superfícies d'energia potencial necessàries per descriure el procés de col·lisió i la resolució de les equacions del moviment, mitjançant una descripció clàssica o quàntica del fenomen, en funció del tipus de sistema i de les magnituds a obtenir, i de la potència de càlcul disponible en cada moment.

12. *Més enllà del moviment electrònic. Alguns fenòmens químics governats pel moviment nuclear*

Josep Maria Lluch

2,9%

Química

UAB

En aquest projecte pretenem aprofundir en el coneixement dels factors que governen les reaccions de transferència protònica i d'hidrogen, cercant un doble objectiu: el desenvolupament de nous mètodes teòrics i el tractament teòric de problemes químics reals basats en aquest tipus de processos. Punts que apareixen repetidament al llarg del projecte són els efectes isotòpics, l'efecte túnel i els ponts d'hidrogen. Alguns dels resultats obtinguts són la caracterització de les propietats estructurals i espectroscòpiques dels complexos de metalls de transició amb un lligand dihidrur comprimit, així com el desenvolupament d'estratègies eficients per localitzar estats de transició en reaccions enzimàtiques utilitzant el mètode micro-iteratiu. En concret s'han estudiat l'enzim "soybean lipoxygenase-1" i la proteïna "green fluorescent protein". A nivell aplicat s'ha utilitzat la Teoria Variacional de l'Estat de Transició per determinar les constants de velocitat de diverses reaccions de la química atmosfèrica i calcular la selectivitat cinètica en reaccions amb punts de bifurcació.

13. *Processos catalítics en fluxos hipersònics: estudi teòric des de primers principis*

Ramon Sayós

2,7%

Química Física

UB

En aquest projecte s'inicia una nova línia de recerca teòrica sobre els processos fisicoquímics que transcorren en la interfase gas-superfície sòlida dels sistemes de protecció tèrmica dels vehicles espacials en vols hipersònics. Diferents mètodes basats en la Teoria del Funcional de la Densitat i també mètodes *ab initio* basats en la funció d'ona seran usats per caracteritzar les superfícies d'energia potencial amb les quals es calcularan propietats dinàmiques i cinètiques de les reaccions implicades. Una de les finalitats és aportar dades que permetin millorar els dissenys d'aquests materials de protecció tèrmica.

14. *Reactivitat química d'antibiòtics β i γ lactàmics*

Francisco Muñoz

2,6%

Química

UIB

Des del seu descobriment els antibiòtics beta-lactàmics han protagonitzat un important paper en el tractament de les malalties produïdes per bacteris. Actualment es fan importants esforços per trobar noves estructures caps de sèrie de noves famílies d'antibiòtics. En el present projecte es pretén realitzar un ampli estudi teòric de l'activitat química i antibacteriana dels compostos beta, gamma lactàmics i azo-derivats del cicle beta-lactàmic. Es proposen dos apartats clarament diferenciats:

- Càlculs *ab initio* i semiempírics de les diferents estructures per determinar la seva reactivitat des d'un punt de vista teòric.
- Càlculs MM-MD-MC per estudiar la interacció d'aquestes estructures amb els aminoàcids que formen el lloc actiu de les beta-lactamases i carboxipeptidases.

15. *Dinàmica no lineal de sistemes quimicofísics*

Francesc Sagués

2,4%

Química Física

UB

S'investiguen diferents aspectes d'autoorganització espaciotemporal associats a la dinàmica no lineal de certs sistemes quimicofísics. En particular, els dos àmbits considerats són els de la cinètica química i l'electroquímica.

En el primer, s'estudien fenòmens tant de segregació (reaccions controlades per difusió) com de propagació de fronts químics. Pel que fa al segon, s'analitzen models d'electrocristal·litització quasi-bidimensional.

16. *Estudi teòric de reaccions d'interès en la química de la troposfera*

Santiago Olivella 2,2%
IIQAB CSIC

En aquest projecte s'empren les eines de la química teòrica per investigar una sèrie de reaccions d'oxidació que tenen gran importància en la química de la troposfera, en les que intervien l'ozó, òxids de nitrogen, àcids, radicals HOx i radicals peròxid. L'interès de la nostra recerca se centra en determinar l'estructura electrònica i reactivitat d'aquestes espècies. Així, l'objectiu fonamental és esbrinar els possibles mecanismes de reacció que hi tenen lloc i avaluar els paràmetres termodinàmics i cinètics corresponents. Els resultats que obtenim permeten predir el comportament de diferents contaminants atmosfèrics i contribueixen a desenvolupar models per a la simulació de la qualitat de l'aire.

17. *Estudi per simulació atòmica del moviment de defectes de línia en fronteres de macla en metalls hexagonals compactes*

Anna Serra 2,1%
Matemàtica Aplicada III UPC

Recentment s'ha desenvolupat un nou mètode de simulació atòmica que permet estudiar el moviment de les dislocacions sense restriccions a causa de les condicions de contorn. El projecte estén el mètode als defectes de línia que hi ha en les fronteres de macla per estudiar les seves propietats estàtiques i dinàmiques.

18. *Determinació electrònica i fonònica en nanoestructures*

Albert Cirera 2,0%
Electrònica UB

Atesa la transcendència de la nanotecnologia i les seves perspectives de futur, en aquest projecte volem determinar les principals característiques estructurals de diferents materials en sistemes de baixa dimensionalitat, com són nanobelts, nanowires o nanorods.

Concretament intentarem trobar l'estructura electrònica i les relacions de dispersió fonòniques en materials d'òxids metàl·lics (SnO₂, TiO₂, MoO₃) sense descartar altres tipus. Per trobar-ho, s'utilitzaran tècniques de càlcul *ab initio* basades en Teoria de Funcional Densitat (DFT) i aproximacions de Densitat Local (LDA) o Gradient Generalitzat (GGA).

Des d'un punt de vista computacional, utilitzarem programari lliure (SIESTA) que dona unes prestacions molt adequades per aquest estudi, que ha estat àmpliament comprovat i que, per la proximitat d'un dels seus desenvolupadors (P. Ordejón, ICMAB), hem pogut aprendre'n directament l'ús. Per utilitzar aquest programari només ens caldrà la compilació en Fortran 90. Idealment, el programa s'haurà de córrer en multiprocessadors del tipus CPQ HPC320, HP GS 1280 o bé la nova Altix.

19. *Anàlisi de densitats mono i bioelectròniques: nous desenvolupaments metodològics i aplicacions*

Miquel Duran i Miquel Solà 1,9%
Institut de Química Computacional UdG

La química quàntica moderna ofereix un gran ventall de mètodes computacionals que permeten tractar la major part de problemes plantejats per la química experimental. A banda dels mètodes que permeten obtenir la funció d'ona i la densitat electrònica dels sistemes en estudi, hi ha cada cop més la necessitat de disposar d'eines computacionals que ens permetin extreure la informació rellevant dels càlculs mecanoquàntics. En aquest projecte es desenvolupen nous mètodes i s'apliquen d'altres ja existents que permeten extreure informació d'interès de les densitats mono i bioelectrònica.

20. *Estructura a gran escala a l'Univers*

Enrique Gaztañaga 1,7%

IEEC - Astrofísica

CSIC

Ens proposem realitzar les majors simulacions numèriques, fins ara conegudes, de l'estructura de l'Univers a gran escala. Per poder portar a terme això, utilitzarem MASCLET, un nou codi multidimensional AMR que utilitza memòria compartida i s'ajusta a les prestacions del nou superordinador Altix del CESCA. Aquestes simulacions ens ajudaran a entendre, amb més detall, com es formen les estructures a l'univers i què paper relatiu juguen la matèria fosca, l'energia obscura i el gas bariònic.

21. *GAIA, el cens de la nostra galàxia*

Jordi Torra

1,7%

Astronomia i Meteorologia

UB

La missió GAIA és un projecte de l'Agència Espacial Europea (ESA) que té com a objectiu construir un mapa tridimensional de la galàxia amb les dades astromètriques de més de 1.000 milions d'objectes de la nostra galàxia i de més enllà.

Durant els tres darrers anys, el consorci format per la UB, el CESCA, i liderat per l'empresa GMV, ha simulat dades a gran escala de la missió GAIA i ha posat les bases per l'estudi del seu sistema operacional. Utilitzant els ordinadors del CESCA, s'han realitzat nombrosos tests i anàlisis del sistema de reducció que han culminat amb una prova de GIS (Global Iterative Solution) amb dades de 200.000 estrelles per a 18 mesos de missió.

Per primer cop s'ha pogut provar la factibilitat de la solució proposada per a l'extracció de les dades científiques de la missió. Prèviament s'ha demostrat la capacitat del sistema GDAAS per realitzar les operacions fonamentals amb les dades: ingestió a la base de dades, identificació d'estrelles i observacions, i tractament inicial. A la fi de 2004, el comitè directiu del GAIA Data Access and Analysis Study ha donat per completada la primera gran fase de test del sistema d'emmagatzematge i reducció de les dades del satèl·lit GAIA (GDAAS).

22. *Simulació molecular de materials i fluids*

Lourdes Vega

1,6%

ICMAB - Materials Moleculars i Supramoleculars

CSIC

L'objectiu del grup és el desenvolupament i l'aplicació d'eines de simulació i modelat molecular a la resolució de determinats problemes relacionats amb l'enginyeria química i ciència de materials. Aquesta metodologia permet obtenir, a més a més d'una predicció fiable de determinades propietats, informació microscòpica addicional, aprofundint en l'entesa i predicció d'aquestes propietats. L'activitat del grup se centra en dues grans línies: predicció de propietats termodinàmiques i de transport de fluids d'interès industrial i modelatge, caracterització i aplicació de materials.

23. *Cinètica i dinàmica de reaccions implicades en química atmosfèrica i en processos de combustió*

Miguel González

1,0%

Química Física

UB

En aquest projecte es realitzarà un estudi teòric de la cinètica i dinàmica de reaccions químiques de rellevància en química atmosfèrica i en processos de combustió on intervien principalment les espècies atòmiques O(¹D), O(³P), N(²D), N(⁴S) amb diverses molècules. Primer, es construiran les superfícies d'energia potencial analítiques implicades emprant mètodes *ab initio* d'elevat nivell. Posteriorment, es portarà a terme l'estudi cinètic i dinàmic mitjançant la teoria variacional de l'estat de transició, el mètode de trajectòries quassiclàssiques i mètodes mecano-quàntics aproximats.

24. *Hidròlisi enzimàtica de nucleòtids i àcids nucleics: estudis mecanístics*

Jesús Giraldo

0,8%

Química Física

UAB

La hidròlisi enzimàtica de nucleòtids (GTP, ATP) i àcids nucleics (ADN, ARN) és un procés fonamental en biologia. A fi i efecte d'elucidar els determinants estructurals i energètics de la reacció, s'estudiaran models reduïts de sistemes simulant la hidròlisi de ribo- i desoxiribonucleòtids mitjançant càlculs QM *ab initio*. La mida d'aquests sistemes s'augmentarà progressivament fins a incloure tot el sistema complet. L'anàlisi final es portarà a terme mitjançant mètodes de càlcul híbrids QM/MM.

25. *Estudi mecano-quàntic de les propietats físico-químiques de filosilicats 2:1 dioctaédrics*

Claro Ignacio Saínz Díaz 0,6%
 Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra CSIC

S'investiga la deshidroxilació de la pirofilita i altres argiles a nivell mecanoquàntic, determinant l'estructura dels reactius, intermedis de reacció, productes i estats de transició, així com les interaccions de pont d'hidrogen dels grups hidroxil d'aquestes estructures. S'usa principalment el programa GAUSSIAN a alt nivell de teoria amb models de les estructures obtingudes prèviament amb Dinàmica Molecular *ab initio*. Es fan també càlculs parcials dels sistemes cristal·lins amb els programes CASTEP i SIESTA en mode monoprocessador.

26. *Anàlisi de la variabilitat nucleotídica a escala genòmica: Estimació de paràmetres poblacionals per simulació*

Montserrat Agudé 0,6%
 Genètica UB

L'objectiu és l'anàlisi de la variabilitat nucleotídica en genomes d'individus d'una mateixa espècie -o d'espècies properes- per obtenir informació sobre les forces evolutives que han actuat sobre les seqüències d'ADN. A causa de fer l'anàlisi a escala genòmica, les necessitats computacionals són molt elevades.

27. *Estructura electrònica de nitrurs de baixa dimensionalitat*

Enric Canadell 0,5%
 ICMAB - Materials Moleculars i Supramoleculars CSIC

Els metalls de baixa dimensionalitat solen presentar transicions metall-metall o metall-aïllant degudes a la topologia de la seva superfície de Fermi. Recentment s'han preparat diferents nitrurs ternaris de metalls de transició que es poden considerar de baixa dimensionalitat. En aquest projecte s'estudiarà l'estructura de bandes i la superfície de Fermi d'alguns d'aquests sòlids (CaTaN₂, LiMoN₂, FeWN₂, etc) a fi d'entendre les seves propietats de transport.

28. *Estudi de primers principis sobre materials complexos d'interès tecnològic*

Pablo Jesús Ordejón 0,5%
 ICMAB - Materials Moleculars i Supramoleculars CSIC

Aquest projecte pretén estudiar diversos problemes en materials i dispositius d'interès tecnològic. Amb aquesta finalitat es farà servir la versió paral·lela del programa SIESTA, que ha estat desenvolupada molt recentment. En particular, estudiarem problemes relacionats amb el creixement i deposició de nanotubs de carboni, pel·lícules primes d'òxids sobre silici, i molècules d'ADN en dissolució.

29. *Dinàmica molecular dels complexos d'inclusió*

Carles Jaime 0,5%
 Química UAB

La formació de complexos d'inclusió amb ciclodextrines modifica les propietats físicoquímiques dels substrats inclosos. El coneixement de l'estequiometria, constant de formació i geometria 3D dels complexos d'inclusió és l'objectiu dels investigadors en aquest camp. Els dos primers poden determinar-se per mitjà d'estudis d'RMN. El nostre objectiu és entendre i determinar la geometria 3D emprant tècniques computacionals com ara la dinàmica molecular.

30. *Transport de partícules en el camp magnètic interplanetari (turbulent-divergent)*

Blai Sanahuja 0,4%
 Astronomia i Meteorologia UB

Els esdeveniments energètics de partícules són el resultat de l'acceleració de partícules tèrmiques pels xocs magnetohidrodinàmics interplanetaris. Aquests xocs són generats per les ejeccions de massa coronal solar i s'expedeixen i propaguen per tota la heliosfera. Estem desenvolupant un codi que permeti obtenir perfils d'aquest

esdeveniments, per diferents escenaris interplanetaris al voltant d'1 AU, que sigui útil per fer prediccions en Meteorologia Espacial. L'objectiu es disposar d'una eina de predicció i contrast, amb aplicacions a qüestions de seguretat front a la radiació, per a instrumentació embarcats a bord de satèl·lits i sondes espacials, i per a astronautes.

La distribució percentual d'ús per institució i àrea de coneixement per a aquests 30 projectes és la següent:

	QT	MM	FI	CT	Altres	Subtotal
UB	25,4%	6,9%	4,3%		0,6%	37,2%
UAB	27,6%	5,6%				33,2%
UPC		6,8%	2,3%			9,1%
UdG	2,0%					2,0%
CSIC	3,5%	1,7%	1,8%	0,6%		7,6%
UIB	7,0%					7,0%
ICIQ	4,0%					4,0%
Total	69,5%	21,0%	8,3%	0,6%	0,6%	100,0%

Si s'inclouen tots els 68 projectes, la distribució percentual és:

	QT	MM	FI	CT	MN	IN	Altres	Subtotal
UB	25,0%	6,9%	4,3%				0,7%	36,8%
UAB	26,3%	5,7%	0,3%				0,3%	32,5%
UPC		6,5%	2,1%		0,2%	0,0%	0,0%	8,8%
UPF		0,0%						0,0%
UdG	2,0%							2,0%
URV	0,5%	0,1%	0,0%					0,6%
CSIC	3,3%	1,9%	1,8%	0,6%			0,3%	7,9%
UIB	6,7%							6,7%
ICIQ	3,8%							3,8%
Altres	0,3%	0,2%	0,4%					0,9%
Total	68,0%	21,2%	8,9%	0,6%	0,2%	0,0%	1,3%	100,0%

Si s'acumula el consum per al període 1996-2006, la distribució percentual és:

	QT	MM	FI	CT	MN	IN	Altres	Subtotal
UB	28,3%	7,6%	3,3%	0,3%			0,6%	40,1%
UAB	24,3%	4,2%	0,2%			0,0%	0,1%	28,7%
UPC		3,9%	1,4%	0,3%	0,1%	0,7%	0,0%	6,4%
UPF		1,2%						1,2%
UdG	2,6%		0,0%	0,0%	0,0%			2,6%
URV	1,1%	0,0%	0,0%	0,0%	0,1%			1,2%
UdL	0,5%						0,0%	0,5%
CSIC	3,0%	0,6%	1,1%	0,2%		0,0%	0,2%	5,0%

UIB	10,6%							10,6%
ICIQ	1,4%							1,4%
Altres	0,8%	0,1%	0,4%	0,1%	0,1%	0,4%	0,2%	2,2 %
Total	72,7%	17,5%	6,3%	0,9%	0,4%	1,1%	1,1%	100,0 %

L'evolució històrica de l'ús dels nostres recursos durant els últims cinc anys pels 30 grups de recerca de més consum acumulat des del 1996 és la següent:

Cap de projecte	2002		2003		2004		2005		2006		Total
(Institució)	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	%
1. M. Sodupe (UAB)	2	8	4	6	2	11	1	18	1	17	11,9
2. S. Álvarez (UB)	1	17	1	14	4	6	3	8	5	6	9,3
3. M. Orozco (UB)	4	7	2	9	5	5	6	5	2	7	7,0
4. A. Lledós (UAB)	3	7	3	7	3	8	5	6	4	6	6,9
5. F. Muñoz (UIB)	7	6	6	5	1	21	2	8	14	3	6,1
6. F. Illas (UB)	5	6	7	5	10	4	4	6	10	4	6,0
7. J.M. Lluch (UAB)	6	6	8	4	9	4	8	5	12	3	5,6
8. J.M. Saà (UIB)	8	4	9	4	11	3	13	2	7	4	3,8
9. C. Alemán (UPC)	16	2	10	4	6	5	7	5	3	7	3,5
10. J.J. Novoa (UB)	9	3	13	3	8	4	9	4	6	5	3,5
11. A. Aguilar (UB)	11	3	15	2	14	3	16	2	11	3	3,3
12. M. Duran (UdG)	26	1	14	2	12	3	15	2	19	2	2,5
13. S. Olivella ¹ (CSIC)	13	3	16	2	13	3	18	2	16	2	2,1
14. M. González ² (UB)	10	3	5	6	17	1	17	2	23	1	2,0
15. J. Torra (IEEC)	14	2	19	2	7	4	11	3	21	2	1,7
16. L. Pardo (UAB)	12	3	17	2							1,5
17. F. Maseras (ICIQ)					27	1	10	4	9	4	1,4
18. X. Daura (UAB)			12	4	22	1	22	1	8	4	1,3
19. R. Sayós ² (UB)	10	3	21	1	15	2	12	2	13	3	1,3
20. J. Villà (UPF)	17	1	11	3	18	1	21	1	62	0	1,2
21. A. Solé ³ (UB)	25	1	30	1	26	1	30	0	34	0	1,1
22. J.M. Ricart (URV)	19	1	28	1	28	0	35	0	32	0	1,0
23. A. Serra (UPC)					21	1	14	2	17	2	0,9
24. F. Sagués (UB)	31	1	31	0	23	1	25	1	15	2	0,8
25. C. Jaime (UAB)	23	1	18	2	16	2	24	1	29	1	0,8
26. P.J. Ordejón (CSIC)	21	1	24	1	20	1	28	1	28	1	0,6
27. P.M. Deyà (UIB)	22	1	24	1	25	1	31	0	50	0	0,6
28. A. Cirera (UB)							19	1	18	2	0,6
29. E. Vilaseca (UB)	18	1	26	1	55	0	40	0	45	0	0,5
30. L. Vega (CSIC)							20	1	22	2	0,5

¹ Fins al 2003, el cap d'aquest projecte era el Dr. Josep Maria Anglada.

² Fins a l'any 2002 els Drs. Miguel González i Ramon Sayós van compartir el mateix projecte de recerca. Per això s'ha optat per duplicar la informació històrica durant aquests anys, encara que per calcular el total acumulat s'hagi distribuït a parts iguals entre ambdós.

³ Fins al 2003, el cap d'aquest projecte era el Dr. Santiago Olivella.

Annex IV

Les publicacions realitzades pels projectes

Aquest annex inclou les referències⁶ de les publicacions realitzades pels projectes de supercomputació, classificades per cap de projecte i any de publicació, que s'han introduït el 2006.

Dra. Montserrat Agudé (UB)

- H. Quesada, S.E. Ramos-Onsins, J. Rozas, M. Agudé, “Positive Selection Versus Demography: Evolutionary Inferences Based on an Unusual Haplotype Structure in *Drosophila Simulans*”, *Mol. Biol. Evol.*, vol. 23, 2006, p. 1643-1647.

Dr. Antoni Aguilar (UB)

- D. de Fazio, V. Aquilanti, S. Cavalli, A. Aguilar, J.M. Lucas, “Exact Quantum Calculations of the Kinetic Isotope Effects: Cross Sections and Rate Constants for the F+HD Reaction and Role of Tunnelling”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 125, 2006, p. 1-8.
- M. Sabidó, J. de Andrés, J. Sogas, J.M. Lucas, M. Albertí, A. Aguilar, “Reactive and Charge Transfer Processes in Electronically Inelastic Collisions Between Ground State Cadmium(II) Diiodide Molecules and Lithium Ions in the 0.10 - 4.00 keV Energy Range by Crossed Molecular Beams”, *Chemical Physics Letters*, vol. 425, 2006, p. 234-241.
- R. Martínez, J.M. Lucas, X. Giménez, A. Aguilar, M. González, “Exact Quantum Dynamics Study of the $O^+ + H_2 (v=0, j=0) \rightarrow OH^+ + H$ Ion-Molecule Reaction and Comparison with Quasiclassical Trajectory Calculations”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 124, 2006, p. 144301 (1-9).
- M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, F. Pirani, D. Cappelletti, C. Coletti, N. Re, “Atom-Bond Pairwise Additive Representation for Cation-Benzene Potential Energy surfaces: an *Ab Initio* Validation Study”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 9002-9010.
- M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, D. Capeletti, A. Laganà, F. Pirani, “Dynamics of Rb^+ -benzene and Rb^+ -benzene- Ar_n ($n \leq 3$) Clusters”, *Chemical Physics*, vol. 328, 2006, p. 221-228.
- M. Alagia, B.G. Brunetti, P. Candori, S. Falcinelli, M.M. Teixidor, F. Pirani, R. Richter, S. Stranges, F. Vecchiocattivi, “The Double Photoionization of Hydrogen Iodide Molecules”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 124, 2006. Art. No. 204318.

⁶ Cal tenir en compte que des del 2003 la recopilació d'aquesta informació és obligatòria per als grups de càlcul grans i mitjans (és a dir, grups amb 15.000 i 7.500 HC, respectivament), mentre que és opcional per als petits.

- M. Albertí, A. Aguilar, J.M. Lucas, A. Laganà, F. Pirani, “From Ar Clustering Dynamics to Ar Solvation for Na⁺-benzene”, *The Journal of Physical Chemistry A*, 2006. ID jp066928g.
- A. Aguilar, M. Albertí, A. Laganà, L. Pacifici, “A Molecular Dynamics Study for the Isomerization of Ar Solvated (benzene)₂-K⁺ Heteroclusters”, *Chemical Physics*, vol. 327, 2006, p. 105-111.
- L. Pacifici, M. Albertí, A. Aguilar, A. Laganà, “A MD Study of the Solvation of (benzene)_n-alkaline Ions Heteroclusters by Rare Gas Atoms”, *Science and Supercomputing in Europe*, 2004, p. 130-132. HPC-Europa 2005.

Dr. Carlos Alemán (UPC)

- J. Casanovas, D. Zanuy, C. Alemán, “Conducting Polymer Actuator Mechanism Based on the Conformational Flexibility of calix[4]arenes”, *Angew. Chem.Int. Ed.*, vol. 45, 2006, p. 1103-1105.
- D. Curcó, C. Alemán, “Modeling the Amorphous Phase of Comblike Polymers”, *J. Polym. Sci.: Pol. Phys.*, vol. 44, 2006, p. 953-966.
- D. Zanuy, C. Alemán, “Effect of the Environment on the Stability of Surfactant Polypeptide Self-Assembled Complexes: Molecular Dynamics Simulations of Stoichiometric Complexes Formed by *n*-Dodecyltrimethylammonium and Poly(α ,L-glutamate) in Chloroform, Methanol and Water”, *J. Polym. Sci.: Polym. Phys.*, vol. 44, 2006, p. 1122-1133.
- C. Ocampo, C. Alemán, D. Curcó, J. Casanovas, “Ester Substitution in 2,2'-bithiophene: Analyses of the Changes Induced in the Structural and Electronic Properties”, *Synth. Met.*, vol. 156, 2006, p. 602-609.
- C. Ocampo, J. Casanovas, F. Liesa, C. Alemán, “Polymers and Oligomers Derived from Pyrrole and N-Hydroxymethylpyrrole: a Theoretical Analysis of the Structural and Electronic Properties”, *Polymer*, vol. 47, 2006, p. 3257-3262.
- J. Casanovas, A.I. Jiménez, C. Cativiela, J.J. Pérez, C. Alemán, “Conformational Analysis of a Cyclopropane Analogue of Phenylalanine with Two Geminal Phenyl Substituents”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 5762-5766.
- D. Zanuy, J. Casanovas, C. Alemán, “Conformational Features of an Actuator Containing calix[4]arene and thiophene: a Molecular Dynamics Study”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 9876-9881.
- J. Casanovas, D. Zanuy, R. Nussinov, C. Alemán, “Identification of the Intrinsic Conformational Properties of 1-aminocyclobutane-1-carboxylic Acid”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 429, 2006, p. 558-562.
- C. Alemán, D. Zanuy, J. Casanovas, C. Cativiela, R. Nussinov, “Backbone Conformational Preferences and Pseudorotational Ring Puckering of 1-aminocyclopentane 1-carboxylic acid”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 21264-21271.

- D. Curcó, F. Rodríguez-Ropero, C. Alemán, “Force-Field Parametrization of Retro-Inverso Modified Residues: Development of Torsional and Electrostatic Parameters”, *J. Comput. Aided Mol. Design.*, vol. 20, 2006, p. 13-25.
- C. Alemán, E.A. Armelin, J.I. Iribarren, F. Liesa, M. Laso, J. Casanovas, “Structural and Electronic Properties of 3,4-ethylenedioxythiophene, 3,4-ethylenedisulfanylfurane and Thiophene Oligomers: A Theoretical Investigation”, *Synth. Met.*, vol. 149, 2005, p. 151-156.
- C. Alemán, J. Casanovas, D. Zanuy, H.K. Hall, Jr., “Systematic Evaluation of the Conformational Properties of Aliphatic ω -Hydroxyacids”, *J. Org. Chem.*, vol. 70, 2005, p. 2950-2956.
- C. Alemán, R. Oliver, E. Brillas, J. Casanovas, F. Estrany, “A Combined Theoretical and Experimental Investigation about the Influence of the Dopant in the Anionic Electropolymerization of α -Tetrathiophene”, *Chem. Phys.*, vol. 314, 2005, p. 1-7.
- C. Alemán, A. I. Jiménez, C. Cativiela, J.J. Pérez, J. Casanovas, “Unusually High Pyramidal Geometry of the Bicyclic Amide Nitrogen in a Complex 7-azabicyclo[2.2.1]heptane Derivative: Theoretical Analysis Using a Bottom-up Strategy”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 109, 2005, p. 11836-11841.
- D. Curcó, J. Casanovas, M. Roca, C. Alemán, “A Method for Generating Reliable Atomistic Models of Amorphous Polymers Based on a Random Search of Energy Minima”, *Comput. Phys. Commun.*, vol. 169, 2005, p. 335-338.
- C. Alemán, A.M. Namba, J. Casanovas, “Acid-Based and Electronic Structure Dependent Properties of Hoechst 33342”, *J. Biomol. Struct. Dyn.*, vol. 23, 2005, p. 29-36.
- C. Alemán, R. Oliver, E. Brillas, J. Casanovas, F. Estrany, “A Combined Theoretical and Experimental Investigation about the Influence of the Dopant in the Anodic Electropolymerization of α -Tetrathiophene”, *Chem. Phys.*, vol. 323, 2005, p. 407-412.
- J. Casanovas, L.X. Cho, C. Ocampo, C. Alemán, “A Theoretical Study of the Effects Produced by N-hydroxyalkyl Substitution in Pyrrole Oligomers”, *Synth. Met.*, vol. 151, 2005, p. 239-245.
- C. Alemán, J. Casanovas, “Theoretical Investigation on the Rotational Isomerism of calix[4]arenes: Influence of the Hydroxyl-->Methoxy Replacement”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 109, 2005, p. 8049-8054.
- C. Alemán, J. Casanovas, H.K. Hall, Jr., “Systematic Evaluation of the Conformational Properties of Aliphatic ω -Methoxy Methyl Esters”, *J. Org. Chem.*, vol. 70, 2005, p. 7731-7736.
- C. Alemán, D. Curcó, J. Casanovas, “Reliability of the Density Functional Approximation to Describe the Charge Transfer and Electrostatic Complexes Involved in the Modeling of Organic Conducting Polymers”, *Phys. Rev. E*, vol. 72, 2005, p. 26704 (1-6).
- J. Casanovas, D. Zanuy, C. Alemán, “Structural and Electronic Effects Induced by Carboxylic Acid Substitution in Isomeric 2,2'-Bithiophenes and Oligothiophenes: A Computational Study”, *Polymer*, vol. 46, 2005, p. 9452-9460.

- J. Casanovas, A.M. Namba, R. da Silva, C. Alemán, “DFT-GIAO Study of Aryltetralin Lignan Lactones: Conformational Analyses and Chemical Shifts Calculations”, *Biorg. Chem.*, vol. 33, 2005, p. 484-492.
- F. Rodríguez-Roperó, J. Casanovas, C. Alemán, “Solvation of 2,2'-bithiophene: Influence of the First Solvation Shell in the Properties of π -Conjugated System”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 416, 2005, p. 331-335.

Dr. Santiago Álvarez (UB)

- M.A. Carvajal, S. Álvarez, J.J. Novoa, “The Nature of the AuI...AuI Interactions Between Cationic [AuL₂]⁺ Complexes in the Solid State”, *Theor. Chem. Acc.*, vol. 116, 2006, p. 472-479.
- E. Ruiz, F. Nunzi, S. Álvarez, “Magnetic Communication through Functionalised Nanotubes”, *Nano Lett.*, vol. 6, 2006, p. 380-384.
- G. Aullón, S.M. Gorun, S. Álvarez, “Effects of Tris(pyrazolyl)borato Ligand Substituents on Dioxygen Activation and Stabilization by Copper Compounds”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 3594-3601.
- T. Cauchy, E. Ruiz, S. Álvarez, “Exchange Coupling Interactions in a Fe₆ Complex: A Theoretical Study using Density Functional Theory”, *Physica B*, vol. 384, 2006, p. 116-119.
- C.E. Talbot-Eeckelaers, G. Rajaraman, J. Cano, G. Aromí, E. Ruiz, E.K. Brechin, “Encouraging Chromium(III) Ions to Form Larger Clusters: Syntheses, Structures, Magnetic Properties and Theoretical Studies of Di- and Octametalllic Cr Clusters”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2006, p. 3382-3392.
- T. Cauchy, E. Ruiz, S. Álvarez, “Magnetostructural Correlations in Polynuclear Complexes: The Fe₄ Butterflies”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, 2006, p. 15722-15727. DOI 10.1021/ja0641498.
- J. Tercero, E. Ruiz, S. Álvarez, A. Rodríguez-Forteá, P. Alemany, “Density Functional Study of Magnetostructural Correlations in Cubane Complexes containing the Cu₄O₄ Core”, *J. Materials Chem.*, vol. 16, 2006, p. 2729-2735.
- D. Venegas-Yazigi, E. Ruiz, S. Álvarez, “Theoretical Study of the Exchange Coupling Constants of a Ni₁₂ Single Molecule Magnet”, *Dalton Trans.*, 2006, p. 2643-2646.
- G. Aullón, P.V. Bernhardt, F. Bozoglián, M. Font-Bardía, B.P. Macpherson, M. Martínez, C. Rodríguez, X. Solans, “Isomeric Distribution and Catalyzed Isomerization of Cobalt(III) Complexes with Pentadentate Macrocyclic Ligands. Importance of Hydrogen Bonding”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 8551-8562.
- I. Angurell, O. Rossell, M. Seco, E. Ruiz, “Dendrimers Containing Two Metallic Layers. Chloride Migration from Peripheral Glod, Palladium, or Rhodium Metals to Internal Ruthenium Atoms”, *Organometallics*, vol. 24, 2005, p. 6365-6373.

Dr. Pelayo Camps (UB)

- C. Ayats, P. Camps, M. Font-Bardia, M.R. Muñoz, X. Solans, S. Vázquez, “Alternative Syntheses of the D_{2d} symmetric 1,3,5,7-tetraiodotricyclo[3.3.0.0^{3,7}]octane”, *Tetrahedron*, vol. 62, 2006, p. 7436-7444.
- P. Camps, M.R. Muñoz, S. Vázquez, “Generation and Trapping of Tricyclo[3.3.0.0^{3,7}]oct-1(5)-ene Derivatives Containing Carbonyl Functionalities”, *Tetrahedron*, vol. 62, 2006, p. 7645-7652.
- C. Ayats, P. Camps, J.A. Fernández, S. Vázquez, “Dehalogenation of 1,3-Diiodotricyclo[3.3.0.0^{3,7}]octane: Generation of 1,3-dehydrotricyclo[3.3.0.0^{3,7}]octane, a 2,5-methano-bridged [2.2.1]Propellane”, *Chemistry, European Journal*, 2006, p. *In press*.

Dr. Enric Canadell (CSIC)

- G. Tobías, E. Canadell, “Nature of the Bottom t_{2g}-block Bands of Layered Perovskites. Implications for the Transport Properties of Phases where these Bands are Partially Filled”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, 2006, p. 4318-4329.
- D. Errandonea, D. Martínez-García, A. Segura, A. Chevy, G. Tobías, E. Canadell, P. Ordejón, “Systematic Determination of the High-Temperature Phase Diagram of InSe: A Comprehensive Study of the Electronic and Structural Properties of the Monoclinic Phase InSe under High Pressure”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, 2006, p. 235202 (1-11).
- P. Alemany, M. Lluell, E. Canadell, “Concerning the Different Roles of Cations in the Metallic Zintl Phases: Ba₇Ga₄Sb₉ as a Test Case”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 7235-7241.
- E. Machado-Charry, P. Ordejón, E. Canadell, C. Brun, Z.Z. Wang, “Nature of the Scanning Tunneling Microscopy Images of the Charge Density Wave Phase in Quasi-One-Dimensional Rb_{0.3}MoO₃”, *Phys. Rev. B*, vol. 74, 2006, p. 155123 (1-6).
- A. Rodríguez-Forteza, C. Rovira, P. Ordejón, C. Hérold, E. Canadell, “Electronic Structure and Charge Transfer in the Ternary Intercalated Graphite β-KS_{0.25}C₃”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 9387-9393.
- B. Braïda, S. Adams, E. Canadell, “Concerning the Structure of Hydrogen Molybdenum Bronze Phase III. A Combined Theoretical-Experimental Study”, *Chem. of Mater.*, vol. 17, 2005, p. 5957-5969.
- P. Alemany, M. Lluell, E. Canadell, “Electronic Structure of the K₃Bi₂ Metallic Phase”, *Inorg. Chem.*, vol. 44, 2005, p. 1644-1646.
- D. Errandonea, A. Segura, A. Chevy, E. Machado, G. Tobías, P. Ordejón, E. Canadell, “Crystal Symmetry and Pressure Effectson the Valence Band Structure of γ-InSe and e-GaSe. An Investigation Through Transport Measurements and Electronic Structure Calculations”, *Phys. Rev. B*, vol. 71, 2005, p. 125206 (1-11).

- P. Alemany, M. Lluell, E. Canadell, “Electronic Structure of Li_2Ga and Li_9Al_4 , Two Solids Containing Infinite and Uniform Zigzag Chains”, *Inorg. Chem.*, vol. 44, 2005, p. 374-381.
- R. Llusar, C. Vicent, S. Uriel, J.M. Clemente-Juan, E. Coronado, C. Gómez-García, B. Braïda, E. Canadell, “Single-Component Magnetic Conductors Based on Mo_3S_7 Trinuclear Clusters with Outer Dithiolate Ligands”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, p. 12076-12083.
- F.J. Manjón, A. Segura, V. Muñoz, G. Tobías, P. Ordejón, E. Canadell, “Investigation of the Band Structure of Indium Selenide by Means of Intrinsic Photoluminescence Under High Pressure”, *Phys. Rev. B*, vol. 70, 2004, p. 125201 (1-12).
- D.A. Scherlis, Y.J. Lee, C. Rovira, S. Adams, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “Concerning the Origin of Superstructures in Hydrogen Molybdenum Bronzes H_xMoO_3 ”, *Solid State Ionics*, vol. 168, 2004, p. 291-298.
- J.M. Oliva, M. Lluell, P. Alemany, E. Canadell, “Quantitative vs. Qualitative Approaches to the Electronic Structure of Solids”, *J. Solid State Chem.*, vol. 176, 2003, p. 375-389.
- J. Fraxedas, Y.J. Lee, I. Jiménez, R. Gago, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “Characterization of the Unoccupied and Partially Occupied States of TTF-TCNQ by XANES and First-Principles DFT Calculations”, *Phys. Rev. B*, vol. 68, 2003, p. 195115 (1-11).
- Y.J. Lee, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “First-Principles Characterization of the Electronic Structure of the Molecular Superconductor $\beta\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{IBr}_2$ ”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, 2003, p. 180505 R (1-4).
- A. Rodríguez-Forteza, E. Canadell, “Localized vs. Delocalized Bonding in the K_5Bi_4 Metallic Salt”, *Inorg. Chem.*, vol. 42, 2003, p. 2759-2763.
- J.M. Oliva, E. Canadell, “Possible Non-Activated Conductivity of the Low-Dimensional Ternary Nitride Ca_2GeN_2 ”, *Inorg. Chem.*, vol. 41, 2002, p. 4630-4632.
- J.L. Mozos, P. Ordejón, E. Canadell, “First Principles Study of the Blue Bronze $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ ”, *Phys. Rev. B*, vol. 65, 2002, p. 233105 (1-4).

Dr. Albert Cirera (UB)

- J.D. Prades, A. Cirera, J.R. Morante, J.M. Pruneda, P. Ordejón, “*Ab Initio* Study of NO_x Compounds Adsorption on SnO_2 Surface”, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2006. *In press*.
- J.D. Prades, J. Arbiol, A. Cirera, J.R. Morante, M. Avella, L. Zanotti, E. Comini, G. Faglia, G. Sberveglieri, “Defect Study of SnO_2 Nanostructures by Cathodoluminescence Analysis: Application to Nanowires”, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2006. *In press*.

Drs. Miquel Solà i Miquel Duran (UdG)

- A.A. Voityuk, Quantum Chemical Modeling of Charge Transfer in DNA, E.B. Starikow, J.P. Lewis, S. Tanaka, Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of Biopolymers, Elsevier, Amsterdam, 2200, p. 99-119 ISBN: 0-444-52220-4.
- J. Poater, M. Solà, F.M. Bickelhaupt, “A Model of the Chemical Bond Must be Rooted in Quantum Mechanics, Provide Insight, and Possess Predictive Power”, *Chem. Eur. J.*, vol. 12, 2006, p. 2902-2905.
- E. Matito, M. Duran, M. Solà, “A Novel Exploration of the Hartree-Fock Homolytic Dissociation Problem in the Hydrogen Molecule by Means of Electron Localization Measures”, *J. Chem. Educ.*, vol. 83, 2006, p. 1243-1248.
- A. Poater, S. Moradell, E. Pinilla, J. Poater, M. Solà, M.A. Martínez, A. Llobet, “A Trinuclear Pt(II) Compound with Short Pt-Pt-Pt Contacts. An Analysis of the Influence of p-p Stacking Interactions on the Strength and Length of the Pt-Pt Bond”, *Dalton Trans.*, 2006, p. 1188-1196.
- M. Güell, E. Matito, J.M. Luis, J. Poater, M. Solà, “Analysis of Electron Delocalization in Aromatic Systems: Individual Molecular Orbital Contributions to Para-Delocalization Indexes (PDI)”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 11569-11574.
- A.A. Voityuk, “Accurate Treatment of Energetics and Geometry of Carbon and Hydrocarbon Compounds within Tight-Binding Model”, *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 2, 2006, p. 1038-1044.
- J.M. Luis, B. Kirtman, O. Christiansen, “A Variational Approach for Calculating Franck-Condon Factors Including Mode-Mode Anharmonic Coupling”, *J. Chem. Phys.*, vol. 125, 2006, p. 154114.
- S. Osuna, J. Poater, J.M. Bofill, P. Alemany, M. Solà, “Are Nucleus-Independent (NICS) and ¹H NMR Chemical Shifts Good Indicators of Aromaticity in p-Stacked Polyfluorenes?”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 428, 2006, p. 191-195.
- A.A. Voityuk, “Assessment of Semiempirical Methods for the Computation of Charge Transfer in DNA p-stacks”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 427, 2006, p. 177-180.
- E. Matito, J. Kobus, J. Styszynski, “Bond Centred Functions in Relativistic and Non-Relativistic Calculations for Diatomics”, *Chem. Phys.*, vol. 321, 2006, p. 277-284.
- J. Rak, J. Makowska, A.A. Voityuk, “Effect of Proton Transfer on the Electronic Coupling in DNA”, *Chem. Phys.*, vol. 325, 2006, p. 567-574.
- A. Poater, X. Solans-Monfort, E. Clot, C. Copéret, O. Eisenstein, “DFT calculations of d⁰ M(NR)(CHtBu)(X)(Y) (M=Mo, W; R=CPh₃, 2,6-iPr-C₆H₃; X and Y=CH₂tBu, OtBu, OSi(OtBu)₃) Olefin Metathesis Catalysts: Structural, Spectroscopic and Electronic Properties”, *Dalton Trans.*, 2006, p. 3077-3087.
- J. Poater, M. Solà, F.M. Bickelhaupt, “Cuestionada la interpretación de Bader sobre el significado de los puntos críticos de enlace”, *An. Quim.*, vol. 102, 2006, p. 36.

- F.M. Bickelhaupt, M. Solà, C. Fonseca-Guerra, “Covalency in Highly Polar Bonds. Structure and Bonding of Methylalkalimetal Oligomers (CH₃M)_n (M=Li-Rb, n =1,4)”, *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 2, 2006, p. 965-980.
- M. Costas, X. Ribas, A. Poater, J.M. López Balvuenza, R. Xifra, A. Company, M. Duran, M. Solà, A. Llobet, M. Corbella, M.A. Usón, J. Mahía, X. Solans, X. Shan, J. Benet-Buchholz, “Copper(II) Hexaaza Macrocyclic Binuclear Complexes Obtained from the Reaction of Their Copper(I) Derivates and Molecular Dioxygen”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 3569-3581.
- A. Pla-Quintana, A. Torrent, A. Dachs, A. Roglans, R. Pleixats, M. Moreno-Mañas, T. Parella, B. Benet-Buchholz, “Chiral and Stable Palladium(0) Complexes of Polyunsaturated Aza-Macrocyclic Ligands: Synthesis and Structural Analysis”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 5612-5620.
- L. Blancafort, A.A. Voityuk, “CASSCF/CAS-PT2 Study of Hole Transfer in Stacked DNA Nucleobases”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 6426-6432.
- M. Noguera, L. Blancafort, M. Sodupe, J. Bertran, “Canonical Watson-Crick Base Pair Interactions in Pi,Pi* Type Triplet States”, *Mol. Phys.*, vol. 104, 2006, p. 925-931.
- E. Matito, J. Poater, F.M. Bickelhaupt, M. Solà, “Bonding in Methylalkalimetal (CH₃M)_n (M=Li - K; n=1, 4). Agreement and Divergences Between AIM and ELF Analyses”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 7189-7198.
- M. Torrent-Sucarrat, M. Solà, A. Toro-Labbé, “Gas-Phase Structures, Rotational Barriers, and Conformational Properties of Hydroxyl and Mercapto Derivatives of Cyclohexa-2,5-Dienone and -Dienthione”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 8901-8911.
- T.A. Schüttrigkeit, T. Feilitzsch, Ch.K. Kompa, K.A. Lukyanov, A.P. Savitsky, A.A. Voityuk, M.E. Michel-Beyerle, “Femtosecond Study of Light Induced Fluorescence Increase of the Dark Chromoprotein asFP595”, *Chem. Phys.*, vol. 323, 2006, p. 149-160.
- L. Blancafort, “Excited-State potential Energy Surface for the Photophysics of Adenine”, *J. Amer. Chem. Soc.*, vol. 128, 2006, p. 210-219.
- A.A. Voityuk, “Estimation of Electronic Coupling in π -Stacked Donor-Bridge-Acceptor Systems: Correction of the Two-State Model”, *J. Chem. Phys.*, vol. 124, 2006, p. 064505.
- E. Matito, M. Duran, M. Solà, “Erratum: “The Aromatic Fluctuation Index (FLU): A new Aromaticity Index Based on Electron Delocalization”, *J. Chem. Phys.*, vol. 125, 2006, p. 059901.
- A.A. Voityuk, “Electronic Coupling Mediated by Stacked [Thymine-Hg-Thymine] Base Pairs”, *J. Phys.Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 21010-21013.
- E. Matito, B. Silvi, M. Duran, M. Solà, “Electron Localization Function at Correlated Level”, *J. Chem. Phys.*, vol. 125, 2006, p. 024301.
- E. Matito, J. Poater, M. Duran, M. Solà, “Electron Fluctuation in Pericyclic and Pseudopericyclic Reactions”, *ChemPhysChem*, vol. 7, 2006, p. 111-113.
- J. Rak, A. Sadowska-Aleksiejew, A.A. Voityuk, “Effects of Intra Base-Pairs Flexibility on Hole Transfer Coupling in DNA”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 429, 2006, p. 546-550.

- N. Martín, M. Altable, S. Filippone, A. Martín-Domenech, M. Güell, M. Solà, “Unprecedented Thermal [2+2] Intramolecular Cyclization of Fuller-1,6-enynes”, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.*, vol. 45, 2006, p. 1439-1442.
- M. Duran, “Un món material avançat i sostenible. La recerca en química”, *Revista de Girona*, vol. 234, 2006, p. 82-87.
- J. Poater, J.M. Bofill, P. Alemany, M. Solà, “The Role of Electron Density and Magnetic Couplings on the NICS Profiles of [2.2]paracyclophane and Related Species”, *J. Org. Chem.*, vol. 71, 2006, p. 1700-1702.
- L. Blancafort, M. Solà, “The Pseudo-Jahn-Teller Effect as the Origin of the Exalted Frequency of the b_{2u} Kekulé Mode in the 11B_{2u} Excited State of Benzene”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 11219-11222.
- J. Miró, “Temps difícils: la recerca en ciències en la primera època del Col·legi Universitari de Girona”, *Revista de Girona*, vol. 234, 2006, p. 64-68.
- S. Bonness, B. Kirtman, M. Huix, A.J. Sanchez, J.M. Luis, “Simulation of Photoelectron Spectra with Anhar-Monicity fully Included: Application to the X²A₂ ← X¹A₁ Band of Furan”, *J. Chem. Phys.*, vol. 125, 2006, p. 14311.
- L. Blancafort, M.J. Bearpark, M.A. Robb, “Ring Puckering of Cyclooctatetraene and Cyclohexane is Induced by Pseudo-Jahn-Teller Coupling”, *Mol. Phys.*, vol. 104, 2006, p. 2007-2010.
- X. Ribas, R. Xifra, T. Parella, A. Poater, M. Solà, A. Llobet, “Regiospecific C-H Activation: Reversible H/D Exchange Promoted by Cu(I) Complexes with Triazamacrocyclic Ligands”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, vol. 45, 2006, p. 2941-2944.
- T. van der Wijst, C. Fonseca-Guerra, M. Swart, F.M. Bickelhaupt, “Performance of Various Density Functionals for the Hydrogen Bonds in DNA Base Pairs”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 426, 2006, p. 415-421.
- M. Torrent-Sucarrat, J.M. Anglada, “On The Gas Phase Hydrogen bond Complexes Between Formic Acid and Hydroperoxyl Radical. A Theoretical Study”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 9718-9726.
- A. Company, D. Lamata, A. Poater, M. Solà, E. Rybak-Akimova, L. Que, X. Fontrodona, T. Parella, A. Llobet, M. Costas, “O₂ Chemistry of Dicopper Complexes with Alkyltriamine Ligands. Comparing Synergistic Effects on O₂ Binding”, *Inorg. Chem.*, vol. 45, 2006, p. 5239-5241.
- J.O.C. Jiménez-Halla, E. Matito, J. Robles, M. Solà, “Nucleus-Independent Chemical Shift (NICS) Profiles in a Series of Monocyclic Planar Inorganic Compounds”, *J. Organomet. Chem.*, vol. 691, 2006, p. 4359-4366.
- A. Poater, M. Duran, P. Jaque, A. Toro-Labbé, M. Solà, “Molecular Structure and Bonding of Copper Cluster Monocarbonyls Cu_nCO (n=1-9)”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 6526-6536.
- M.J. Bearpark, L. Blancafort, M.J. Paterson, “Mapping the Intersection Space of the Ground and First Excited States of Fulvene”, *Mol. Phys.*, vol. 104, 2006, p. 1033-1038.

- O. Huertas, J. Poater, M. Fuentes-Cabrera, M. Orozco, M. Solà, F.J. Luque, “Local Aromaticity in Natural Nucleobases and their Size-Expanded Benzo-Fused Derivatives”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 12249-12258.
- M. Palusiak, S. Simon, M. Solà, “Interplay Between Intramolecular Resonance-Assisted Hydrogen Bonding and Aromaticity in o-hydroxyaryl Aldehydes”, *J. Org. Chem.*, vol. 71, 2006, p. 5241-5248.
- J. Poater, M. Solà, F.M. Bickelhaupt, “Hydrogen-Hydrogen Bonding in Planar Biphenyl, Predicted by Atoms-In-Molecules Theory, Does Not Exist”, *Chem. Eur. J.*, vol. 12, 2006, p. 2889-2895.
- X. Sala, E. Plantalech, L. Romero, M. Rodríguez, A. Llobet, A. Poater, M. Duran, M. Solà, S. Jansat, M. Gómez, G. Muller, T. Parella, H. Stoeckli-Evans, J. Benet-Buchholz, “Atropisomeric Discrimination in New RuII Complexes Containing the C2-Symmetric Didentate Chiral Phenyl-1,2-bisoxazolinic Ligand”, *Chem. Eur. J.*, vol. 12, 2006, p. 2798-2807.
- E. Matito, P. Salvador, M. Duran, M. Solà, “Aromaticity Measures from Fuzzy-Atom Bond Orders. The Aromatic Fluctuation (FLU) and the para-Delocalization (PDI) Indexes”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 5108-5113.
- J. Miró, “El doctor Josep Estalella a Girona: fa cent anys”, *Revista de Girona*, vol. 233, 2005, p. 40-43.

Dr. Antonio González (UPC)

- E. Gibert, J. Abella, J. Sánchez, X. Vera, A. González, “Variable-Based Multi-Module Data Caches for Clustered VLIW Processors”, en *Proceedings of the 14th Int. Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques*, 2005, p. 207-217.

Dr. Miguel González (UB)

- C. Oliva, A. Rodríguez, M. González, W. Yang, “A QM/MM Study of the Reaction Mechanism of the Hepatitis C Virus NS3 Proteasa with the NS5A/5B Substrate”, *Proteins*, vol. 66, 2007, p. 444-455.
- R. Martínez, J.M. Lucas, X. Giménez, A. Aguilar, M. González, “Exact Quantum Dynamics Study of the $O^+ + H_2(v=0, j=0) \rightarrow OH^+ + H$ Ion-Molecule Reaction and Comparison with Quasiclassical Trajectory Calculations”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 124, 2006, p. 144301 (1-9).
- J. Mayneris, A. Saracibar, E.M. Goldfield, M. González, E. García, S.K. Gray, “Theoretical Study of the Complex-Forming $CH + H_2 \rightarrow CH_2 + H$ Reaction”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 5542-5548.
- P. Gamallo, R. Sayós, M. González, C. Petrongolo, P. Defazio, “Quantum Real Wave-Packet Dynamics of the $N(^4S) + NO(X^2\Pi) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + O(^3P)$ Reaction on the

Ground and First Excited Triplet Potential Energy Surfaces. Rate Constants, Cross Sections, and Product Distributions”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 124, 2006, p. 174303 (1-11).

- R. Martínez, J.D. Sierra, S.K. Gray, M. González, “Time Dependent Quantum Dynamics Study of the $O^+ + H_2(v=0, j=0) \rightarrow OH^+ + H$ Ion-Molecule Reaction and Isotopic Variants (D_2 , HD)”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 125, 2006, p. 164305 (1-7).

Dra. Isabel Haro Villar (CSIC)

- I. Haro, S. Mazzini, M. Fernández-Vidal, V. Galbusera, F. Castro-Román, M.C. Bellucci, E. Ragg, “3D-Structure of the Interior Fusion Peptide of HGV/GBV-C by 1H NMR, CD and Molecular Modelling Studies”, *8th German Peptide Symposium*, 2006. Heidelberg.
- M. Fernández-Vidal, F. Castro-Román, A.J. Freitas, I. Haro, “MD Simulations of a Putative Fusogenic Sequence in the E2 Hepatitis G Virus Protein and the gp41 Fusion Protein of HIV in a Model Membrane”, *VI Ibero American Congress of Biophysics, Sociedad Biofísica Española, Portuguesa e Iberoamericana*, 2006. Madrid.
- M. Fernández-Vidal, F. Castro-Roman, A.J. Freitas, I. Haro, “MD Simulations of a Putative Fusogenic Sequence in the E2 Hepatitis G Virus Protein and the gp41 Fusion Protein of HIV in a Model Membrane”, *Jornada de Química de Cataluña y Sudoeste Francés, Sociedad Catalana Química*, 2006. Barcelona.

Dr. Francesc Illas (UB)

- D. Torres, N. López, F. Illas, “A Theoretical Study of Coverage Effects for Ethylene Epoxidation on Cu(111) Under Low Oxygen Pressure”, *J. Catal.*, vol. 243, 2006, p. 404-409.
- D. Torres, K.M. Neyman, F. Illas, “Oxygen Atoms on the (111) Surface of Coinage Metals: On the Chemical State of the Adsorbate”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 429, 2006, p. 86-90.
- M. Filatov, “Spin Symmetry Requirements in Density Functional Theory: the Proper Way to Predict Magnetic Coupling Constants in Molecules and Solids”, *Theoret. Chem. Acc.*, vol. 115, 2006, p. 587-597.
- D. Torres, F. Illas, “On the Performance of Au(111) for Ethylene Epoxidation: A Density Functional Study”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 13310-13313.
- A. Valcárcel, J.M. Ricart, A. Clotet, F. Illas, A. Markovits, C. Minot, “Theoretical Study of Dehydrogenation and Isomerization Reactions of Propylene on Pt(111)”, *J. Catal.*, vol. 241, 2006, p. 115-122.
- J. Carrasco, C. Sousa, F. Illas, P.V. Sushko, A.L. Shluger, “Optical Absorption and Luminescence Energies of F Centers in CaO from *Ab Initio* Embedded Cluster Calculations”, *J. Chem. Phys.*, vol. 115, 2006, p. 74710 (1-9).

- A. Migani, F. Illas, “Structure and Bonding of Halogens on Low Index Transition Metal Surfaces: a Systematic Density Functional Study”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 110, 2006, p. 11894-11906.
- S.T. Bromley, I. de P.R. Moreira, F. Illas, J. Wojdel, “Importance of the Embedding Environment on the Strain Within Small Rings in Siliceous Materials”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, 2006, p. 134202 (1-11).
- S. González, C. Sousa, F. Illas, “Promoter and Poisoning Effects on the NO Catalyzed Dissociation on Bimetallic RhCu(111) Surfaces”, *J. Catal.*, vol. 239, 2006, p. 431-440.
- J. Carrasco, F. Illas, N. López, E.A. Kotomin, Y.F. Zhukovskii, R.A. Evarestov, Y.A. Mastrikov, S. Piskunov, J. Maier, “First Principles Calculations of the Atomic and Electronic Structure of *F* Centers in Bulk and on the (001) Surface of SrTiO₃”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, 2006, p. 64106 (1-11).
- J.C. Wojde, M.A. Zwijnenburg, S.T. Bromley, “Magic Silica Clusters as Nanoscale Building Units for Super-(Tris)tetrahedral Materials”, *Chem. Mater.*, vol. 18, 2006, p. 1464-1469.
- C. Adamo, V. Barone, A. Bencini, R. Broer, M. Filatov, N.M. Harrison, F. Illas, J.P. Malrieu, I. de P.R. Moreira, “Comment on About the Calculation of Exchange Coupling Constants Using Density-Functional Theory: The Role of the Self-Interaction Error”, *J. Chem. Phys.*, vol. 124, 2006, p. 107101.
- D. Torres, S. González, K.M. Neyman, F. Illas, “Adsorption and Oxidation of NO on Au(111) Surface: Density Functional Studies”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 422, 2006, p. 412-416.
- R. Grau-Crespo, I. de P.R. Moreira, F. Illas, N.H. de Leeuw, C.R.A. Catlow, “The Effect of Cation Coordination on the Properties of Oxygen Vacancies in FeSbO₄”, *J. Mater. Chem.*, vol. 16, 2006, p. 1943-1949.
- C. López, R. Costa, F. Illas, C. de Graaf, M.M. Turnbull, C.P. Landee, E. Espinosa, I. Mata, E. Molins, “Magnetostructural Correlations in Binuclear Copper(II) Compounds Bridged by a Ferrocenecarboxylato(-1) and an Hydroxo- or Methoxo- Ligands: Tuning the Sign of Superexchange in Heterobridged Complexes”, *Dalton Transactions*, vol. 13, 2005, p. 2322-2330.
- A. Migani, C. Sousa, F. Sanz, F. Illas, “Electric Field Induced Electron Transfer at the Adsorbate-Surface Interface. Effect of the Type of Metal Surface”, *Chem. Chem. Phys.*, vol. 7, 2005, p. 3353-3358.
- C. Adamo, V. Barone, A. Bencini, R. Broer, M. Filatov, N.M. Harrison, F. Illas, J.P. Malrieu, I. de P.R. Moreira, “Comment on About the Calculation of Exchange Coupling Constants Using Density-Functional Theory: The Role of the Self-Interaction Error”, *J. Chem. Phys.*, vol. 123, 2005, p. 164110.

Dr. Carles Jaime (UAB)

- I. Beà, M. Gotsev, P. Ivanov, C. Jaime, P.A. Kollman, “Chelate Effect in Cyclodextrin Dimers - A Computational (MD, MM/PBSA and MM/GBSA) Study”, *J. Org. Chem.*, vol. 71, 2006, p. 2056-2063.
- C. Jaime, M. de Federico, “Computational Studies on Two Supramolecular Species: Cyclodextrins and Rotaxanes”, *Current Organic Chemistry*, vol. 10 (7), 2006, p. 731-743.
- M. Bispo, L. de Matos, L. Fernández, Y. Takahata, A.C.S. Lino, C. Jaime, E. de Paula, “Theoretical and Experimental Study of a Praziquantel and β -Cyclodextrin Inclusion Complex Using Molecular Mechanics Calculations and ^1H -Nuclear Magnetic Resonance”, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, vol. 41, 2006, p. 1428-1432.
- M. Palomino-Schätzlein, A. Virgili, C. Jaime, S. Gil, “Di-(R,R)-1-[10-(1-hydroxy-2,2,2-trifluoroethyl)-9-anthryl]-2,2,2-trifluoroethyl Muconate: a Highly Chiral Cavity for Enantiodiscrimination by NMR”, *J. Org. Chem.*, vol. 71, 2006, p. 8114-8120.
- C.J. Núñez-Agüero, C.M. Escobar-Llanos, D. Díaz, C. Jaime, R. Garduño-Juárez, “Chiral Discrimination of Ibuprofen Isomers in β -Cyclodextrin Inclusion Complexes: Experimental (NMR) and Theoretical (MD, MM/GBSA) Studies”, *Tetrahedron*, vol. 62, 2006, p. 4162-4172.
- I. Maestre, I. Beà, P. Ivanov, C. Jaime, “Structural Dynamics of Some Large-Ring Cyclodextrins (LR-CDs). A Molecular Dynamics Study: an Analysis of Force Field Performance”, *Theor. Chem. Acc.*, 2006. *In press*.
- M. de Federico, C. Jaime, “Free Energy Calculations (FEP and TI): Conformational Preference of a Cyclodextrinic [2]catenane. A Case Study”, *J. Comput. Theor.*, 2006. *In press*.

Dr. Agustí Lledós (UAB)

- J.J. Carbó, A. Lledós, D. Vogt, C. Bo, “Origin of Stereoinduction by Chiral Aminophosphine Phosphinite Ligands in Enantioselective Catalysis. Asymmetric Hydroformylation”, *Chemistry - A European Journal*, vol. 12, 2006, p. 1457-1467.
- M. Viciano, M. Poyatos, M. Sanaú, E. Peris, A. Rossin, G. Ujaque, A. Lledós, “C-H Oxidative Addition of Bisimidazolium Salts to Ir and Rh Complexes, and N-Heterocyclic Carbene Generation. A combined Experimental and Theoretical Study”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 1120-1134.
- G. Kovács, G. Ujaque, A. Lledós, F. Joó, “Theoretical Investigation of the Selective C=C vs. C=O Hydrogenation in Acidic Media Catalyzed by $\{[\text{RuCl}_2(\text{mtppps})_2]\}_2$ ”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 862-872.
- M. Baya, N.V. Belkova, M. Besora, L.M. Epstein, A. Lledós, R. Poli, P.O. Revin, E.S. Shubina, E.V. Vorontsov, “Hydrogen Bonding and Proton Transfer to the Trihydride Complex $\text{Cp}^*\text{MoH}_3(\text{dppe})$: IR, NMR, and Theoretical Investigations”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2006, p. 2192-2209.

- J.D. Maréchal, F. Maseras, A. Lledós, L. Mouawad, D. Perahia, “A DFT Study on the Relative Affinity for Oxygen of the α and β Subunits of Hemoglobin”, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 27, 2006, p. 1446-1453.
- O.A. Filippov, A.M. Filin, N.V. Belkova, A. Lledós, G. Ujaque, L.M. Epstein, E.S. Shubina, “Proton Transfer and H₂ Elimination Reaction of Main Group Hydrides EH₄ (E=B, Al, Ga) with Alcohols”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45, 2006, p. 3086-3096.
- N.V. Belkova, E.I. Gutsul, O.A. Filippov, V.A. Levina, D.A. Valyaev, L.M. Epstein, A. Lledós, E.S. Shubina, “Intermolecular Hydrogen Bonding Between Neutral Transition Metal Hydrides (η^5 -C₅H₅)M(CO)₃H (M=Mo, W) and Bases”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 3486-3487.
- A. Nova, P. González-Duarte, A. Lledós, R. Mas-Ballesté, G. Ujaque, “Aliphatic C-X (X=halogen) Bond Activation by Transition Metal Complexes Containing the {Pt₂S₂} Core: A Theoretical Study of the Reaction Mechanism”, *Inorganica Chimica Acta*, vol. 359, 2006, p. 3736-3744.
- L.R. Falvello, J.C. Ginés, J.J. Carbó, A. Lledós, R. Navarro, T. Soler, E.P. Urriolabeitia, “Palladium Complexes of a Phosphorus Ylide with Two Stabilizing Groups: Synthesis, Structure and DFT Study of the Bonding Modes”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45, 2006, p. 6803-6815.
- A. Rossin, G. Kovács, G. Ujaque, A. Lledós, F. Joó, “The Active Role of the Water Solvent in the Regioselective C=O Hydrogenation of Unsaturated Aldehydes by [RuH₂(mtppms)_x]”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 5010-5023.
- A.A.C. Braga, N.H. Morgon, G. Ujaque, A. Lledós, F. Maseras, “Computational Study of the Transmetalation Process in the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling of Aryls”, *Journal of Organometallic Chemistry*, vol. 691, 2006, p. 4459-4466.
- M. Besora, F. Maseras, A. Lledós, O. Eisenstein, “Silyl, Hydrido-Silylene or Alternative Bonding Modes: the Many Possible Structures of CpIr(PH₃)X⁺ (X=SiHR₂ and SiR₃; R=H, CH₃, SiH₃ and Cl)”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 4748-4755.
- E. Serrano, C. Vallés, J.J. Carbó, A. Lledós, T. Soler, R. Navarro, E.P. Urriolabeitia, “Mixed P-N and As-N Bis-Ylide Palladium Complexes: Cooperative Intramolecular Interactions, Conformational Preferences and C-H Bond Activations”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 4653-4664.
- J. López-Serrano, S.B. Duckett, A. Lledós, “Palladium-Catalyzed Hydrogenation: Detection of Palladium Hydrides. A Joint Study by Para-Hydrogen-Enhanced NMR Spectroscopy and Density Functional Theory”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 9596-9597.

Dr. Josep Maria Lluch (UAB)

- M. Ochando-Pardo, I. Nebot-Gil, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Methyl Vinyl Ketone + OH and Methacrolein + OH Oxidation Reactions: A Master Equation Analysis of the

- Pressure- and Temperature-Dependent Rate Constants”, *Chemistry. A European Journal*, vol. 13, 2007, p. 1180-1190.
- E. Puig, M. Garcia-Viloca, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “On the Ionization State of the Substrate in the Active Site of Glutamate Racemase. A QM/MM Study about the Importance of being Zwitterionic”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 717-725.
 - N. González-García, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Variational Transition-State Theory Study of the Dimethyl Sulfoxide (DMSO) and OH Reaction”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 798-808.
 - R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Charge-Transfer $\pi\pi^*$ Excited State in the 7-azaindole Dimer. A Hybrid Configuration Interactions Singles/Time-Dependent Density Functional Theory Description”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 1145-1151.
 - R. Casadesús, O. Vendrell, M. Moreno, J.M. Lluch, K. Morokuma, “On the Intramolecular Proton Transfer of 3-hydroxyflavone in the First Singlet Excited State. A Theoretical Study”, *Chemical Physics*, vol. 325, 2006, p. 243-250.
 - N. González-García, J. Pu, A. González-Lafont, J.M. Lluch, D.G. Truhlar, “Searching for Saddle Points by Using the Nudged Elastic band Method: An Implementation for Gas-Phase Systems”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 2, 2006, p. 895-904.
 - I. Tejero, M. Garcia-Viloca, A. González-Lafont, J.M. Lluch, D.M. York, “Enzyme Dynamics and Tunnelling Enhanced by Compression in the Hydrogen Abstraction Catalyzed by Soybean Lipoxygenase-1”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 110, 2006, p. 24708-24719.
 - S. Ferrer, I. Tuñón, S. Martí, V. Moliner, M. Garcia-Viloca, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “A Theoretical Analysis of Rate Constants and Kinetic Isotope Effects Corresponding to Different Reactant Valleys in Lactate Dehydrogenase”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 16851-16863.
 - R. Casadesús, M. Moreno, J.M. Lluch, “Molecular Modelling of the Kinetic Isotope Effect on the Intramolecular Hydrogen Atom Transfer in Triplet 6,9-dimethylbenzuberone”, *Chemical Physics*, vol. 328, 2006, p. 410-420.
 - D.T. Major, M. Garcia-Viloca, J. Gao, “Path Integral Simulations of Proton Transfer Reactions in Aqueous Solution Using Combined QM/MM Potentials”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 2, 2006, p. 236-245.
 - J.M. Ortiz-Sánchez, R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Theoretical Study on the Excited-State Intramolecular Proton Transfer in the Aromatic Schiff base Salicylidene Methylamine: an Electronic Structure and Quantum Dynamical Approach”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 4649-4656.
 - O. Vendrell, R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Potential Energy Landscape of the Photoinduced Multiple Proton-Transfer Process in the Green Fluorescent Protein: Classical Molecular Dynamics and Multiconfigurational Electronic Structure Calculations”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 3564-3574.

- F.A. Jalon, B.R. Manzano, A. Caballero, M.C. Carrion, L. Santos, G. Espino, M. Moreno, “Facile Ru-H₂ Heterolytic Activation and Intramolecular Proton Transfer Assisted by Basic N-Centers in the Ligands”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, 2005, p. 15364-15365.
- J. Pu, S. Ma, M. Garcia-Viloca, J. Gao, D.G. Truhlar, A. Kohen, “Nonperfect Synchronization of Reaction Center Rehybridization in the Transition State of the Hydride Transfer Catalyzed by Dihydrofolate Reductase”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, 2005, p. 14879-14886.
- M.C. Carrion, F.A. Jalon, I. López-Solera, B.R. Manzano, F. Sepúlveda, L. Santos, A.M. Rodríguez, M. Moreno, M. Martínez-Ripoll, “Theoretical, Dynamic, and Structural Studies of the Phenyl Rotation in Bispentafluorophenyl Palladium Complexes with Scorpion-Type Ligands”, *Canadian Journal of Chemistry*, vol. 83, 2005, p. 2106-2119.

Dr. Feliu Maseras (ICIQ)

- D. García-Cuadrado, A.A.C. Braga, F. Maseras, A.M. Echavarren, “Proton Abstraction Mechanism for the Palladium-Catalyzed Intramolecular Arylation”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, 2006, p. 1066-1067.
- U. Christmann, D.A. Pantazis, J. Benet-Buchholz, J.E. McGrady, F. Maseras, R. Vilar, “Experimental and Theoretical Investigations of New Dinuclear Palladium Complexes as Precatalysts for the Amination of Aryl Chlorides”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, p. 6376-6390.
- C. Jiménez-Rodríguez, F.X. Roca, C. Bo, J. Benet-Buchholz, E.C. Escudero-Adán, Z. Freixa, P.W.N.M. Van Leeuwen, “SPANphos: Trans-spanning Diphosphines as Cis Chelating Ligands”, *Dalton Transactions*, 2006, p. 268-278.
- C. Bo, R. Fandos, M. Feliz, C. Hernández, A. Otero, A. Rodríguez, M.J. Ruiz, C. Pastor, “*Fac* versus *Mer* Coordination for a Tridentate Diethylene Glycolate Ligand in Tantalum Complexes: A Combined Experimental and Theoretical Study”, *Organometallics*, vol. 25, 2006, p. 3336-3344.

Dr. Santiago Olivella (CSIC)

- A. Mansergas, J.M. Anglada, “Reaction Mechanism Between Carbonyl Oxide and Hydroxyl Radical: A Theoretical Study”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 4001-4011.
- J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé, “Hydrogen Transfer Between Sulfuric Acid and Hydroxyl Radical in the Gas Phase: Competition among Hydrogen Atom Transfer, Proton-Coupled Electron-Transfer, and Double Proton Transfer”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 1982-1990.
- A. Mansergas, J.M. Anglada, “Theoretical Characterization of the Gas-Phase O₃···HO Hydrogen-Bonded Complex”, *ChemPhysChem*, vol. 7, 2006, p. 1488-1493.

- M. Torrent-Sucarrat, J.M. Anglada, “On the Gas Phase Hydrogen Bond Complexes Between Formic Acid and Hydroperoxyl Radical. A Theoretical Study”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 9718-9726.
- J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé, “Mechanistic Study of the $\text{CH}_3\text{O}_2^\bullet + \text{HO}_2^\bullet \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2\text{H} + \text{O}_2$ Reaction in the Gas Phase. Computational. Evidence for the Formation of a Hydrogen-Bonded Diradical Complex”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 6073-6082.
- S. Olivella, A. Solé, O. Jiménez, M.P. Bosch, A. Guerrero, “New Selective Haloform-Type Reaction Yielding 3-Hydroxy-2,2-Difluoroacids: Theoretical Study of the Mechanism”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 127, 2005, p. 2620-2627.
- P. Serrano, A. Llebaria, J. Vázquez, J. de Pablo, J.M. Anglada, A. Delgado, “On the Regio- and Stereoselective Synthesis of Aminocyclitols from Cyclitol Epoxides: The Effect of Li as a Chelating Agent”, *Chem. Eur. J.*, vol. 11, 2005, p. 4465-4472.
- J.M. Anglada, V.M. Domingo, “Mechanism for the Gas-Phase Reaction Between Formaldehyde and Hydroperoxyl Radical. A Theoretical Study”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 109, 2005, p. 10786-10794.

Dr. Pablo Jesús Ordejón (CSIC)

- D. Errandonea, D. Martínez-García, A. Segura, A. Chevy, G. Tobías, E. Canadell, P. Ordejón, “High-Pressure, High-Temperature Phase Diagram of InSe: A Comprehensive Study of the Electronic and Structural Properties of the Monoclinic Phase of InSe Under High Pressure”, *Phys. Rev. B*, no. 73, 2006, p. 235202.
- 26. M. Berthe, A. Urbieto, L. Perdigo, B. Grandidier, D. Deresmes, C. Delerue, D. Stievenard, R. Rurali, N. Lorente, L. Magaud, P. Ordejón, “Electron Transport Via Local Polarons at Interface Atoms”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, 2006, p. 206801.
- E. Machado-Charry, P. Ordejón, E. Canadell, C. Brun, Z.Z. Wang, “Analysis of Scanning Tunneling Microscopy Images of the Charge-Density-Wave Phase in Quasi-One-Dimensional $\text{Rb}_{0.3}\text{MoO}_3$ ”, *Phys. Rev. B*, vol. 74, 2006, p. 155123.
- A. Rodríguez-Forteza, C. Rovira, P. Ordejón, C. Herold, P. Lagrange, E. Canadell, “Electronic Structure and Charge Transfer in the Ternary Intercalated Graphite $\beta\text{-KS}_{0.25}\text{C}_3$ ”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45, 2006, p. 9387.
- E. Wachowicz, R. Rurali, P. Ordejón, P. Hylgaard, “First Stages of the Oxidation of the Si-Rich 3C-Si(001) Surface”, *Computational Materials Science*, vol. 33, 2005, p. 13.
- M. Machón, S. Reich, H. Telg, J. Maulzsch, P. Ordejón, C. Thomsen, “Strength of Radial Breathing Mode in Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. B*, vol. 71, 2005, p. 35416.
- D. Errandonea, A. Segura, F. J. Manjón, A. Chevy, E. Machado, G. Tobías, P. Ordejón, E. Canadell, “Crystal Symmetry and Pressure Effects on the Valence Band Structure of $\gamma\text{-InSe}$ and $\epsilon\text{-GaSe}$: Transport Measurements and Electronic Structure Calculations”, *Phys. Rev. B*, vol. 71, 2005, p. 125206.

- E. Fernández, P. Ordejón, L.C. Balbás, “Theoretical Study of O₂ and CO Adsorption on (Au)_n Clusters (n=5-10)”, *Chemical Physics Letters*, vol. 408, 2005, p. 252.
- I. Justicia, G. García, L. Vázquez, J. Santiso, P. Ordejón, G.A. Battiston, R. Gerbasi, A. Figueras, “Self-Doped Titanium Oxide thin Films for Efficient Visible Light Photocatalysis. An example: Nonylphenol Photodegradation”, *Sensors and Actuators B*, vol. 109, 2005, p. 52.
- E. Machado, M. Kaczmarek, P. Ordejón, D. Garg, J. Norman, H. Cheng, “First-Principles Analyses and Predictions on the Reactivity of Barrier Layers of Ta and TaN: Toward Organometallic Precursors for Deposition of Copper Films”, *Langmuir*, vol. 21, 2005, p. 7608.
- J.L. Mozos, E. Machado, E. Hernández, P. Ordejón, “Nanotubes and Nanowires: the Effect of Impurities and Defects on their Electronic Properties”, *Int. J. Nanotechnology*, vol. 2, 2005, p. 114.
- H.A. Al-Britthen, M.B. Haider, R. Yang, C. Constantin, E. Lu, N. Sandler, A. Smith, P. Ordejón, “Scanning Tunneling Microscopy and Surface Simulation of c-GaN(001) Intrinsic 4x Reconstruction: Linear Tetramers?”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, 2005, p. 146102.
- C. Constantin, M.B. Haider, D. Ingram, A.R. Smith, N. Sandler, K. Sun, P. Ordejón, “Composition-Dependent Structural Properties in ScGaN Alloy Films: A Combined Experimental and Theoretical Study”, *J. Appl. Phys.*, vol. 98, 2005, p. 123501.
- R. Rurali, N. Lorente, P. Ordejón, “Comment on “Molecular Distortions and Chemical Bonding of a Large π -Conjugated Molecule on a Metal Surface”, *Phys. Rev. Lett. (Comment)*, vol. 95, 2005, p. 209601.
- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón, “Self-Passivation Mechanisms in Clusters of N Dopants in SiC”, *Physica Status Solidi (c)*, vol. 1, 2004, p. 274.
- X. Blase, P. Ordejón, “Dynamical Screening and Absorption within a Strictly Localized Basis Implementation of Time-Dependent LDA: From Small Clusters and Molecules to Aza-Fullerenes”, *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004, p. 85111.
- J. Maultzsch, S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt, P. Ordejón, “Phonon Dispersion in Graphite”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, 2004, p. 75501.
- D.A. Scherlis, Y.J. Lee, C. Rovira, S. Adams, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “Concerning the Origin of Superstructures in Hydrogen Molybdenum Bronzes H_xMoO₃”, *Solid State Ionics*, vol. 168, 2004, p. 291.
- C.C. Fu, F. Willaime, P. Ordejón, “Stability and Mobility of Mono- and Di-Interstitials in α -Fe”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, 2004, p. 175503.
- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón, “First-Principles Studies of the Diffusion of B Impurities and Vacancies in SiC”, *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004, p. 125203.
- F. El-Mellouhi, N. Mousseau, P. Ordejón, “Sampling the Diffusion Paths of a Neutral Vacancy in Silicon”, *Phys. Rev. B*, vol. 70, 2004, p. 205202.

- F.J. Manjón, A. Segura, V. Muñoz-Sanjosé, G. Tobías, P. Ordejón, E. Canadell, “Band Structure of Indium Selenide Investigated by Intrinsic Photoluminescence under High Pressure”, *Phys. Rev. B*, vol. 70, 2004, p. 125201.
- P. Jensen, X. Blase, P. Ordejón, “Gold Adsorption and Diffusion on Graphite: an *Ab-Initio* Study”, *Surface Science*, vol. 564, 2004, p. 173.
- M. Brandbyge, K. Stokbro, J. Taylor, J.L. Mozos, P. Ordejón, “Origin of Current-Induced Forces in an Atomic Gold Wire: A first-Principles Study”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, 2003, p. 193104.
- M.A. Martí, D.A. Scherlis, F.A. Doctorovich, P. Ordejón, D.A. Estrin, “Modulation of the NO Trans Effect in Heme Proteins: Implications for the Activation of Soluble Guanylate Cyclase”, *J. Biol. Inorg. Chem.*, vol. 8, 2003, p. 595.
- G. Canto, P. Ordejón, H. Cheng, A.C. Cooper, G.P. Pez, “First-Principles Molecular Dynamics Study of the Stretching Frequencies of Hydrogen Molecules in Carbon Nanotubes”, *New J. Phys.*, vol. 5, 2003, p. 124.
- J. Fraxedas, Y.J. Lee, I. Jiménez, R. Gago, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “Characterization of the Unoccupied and Partially Occupied States of TTF-TCNQ by XANES and First-Principles Calculations”, *Phys. Rev. B*, vol. 68, 2003, p. 195115.
- A. Crespo, D.A. Scherlis, M.A. Martí, P. Ordejón, A.E. Roitberg, D.A. Estrin, “A DFT Based QM-MM Approach Designed for the Treatment of Large Molecular Systems: Application to Chorismate Mutase”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 107, 2003, p. 13728.

Dr. Modesto Orozco (UB)

- O. Huertas, J.R. Blas, I. Soteras, M. Orozco, F.J. Luque, “Benzoderivatives of Nucleic Acid Bases as Modified DNA Building Blocks”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 110, 2006, p. 510-518.
- J. López de la Osa, C. González, R. Gargallo, M. Rueda, E. Cubero, M. Orozco, A. Aviñó, R. Eritja, “Destabilization of Quadruplex DNA by 8-aminoguanine”, *ChemBioChem*, vol. 7, 2006, p. 46-48.
- A. Noy, T. Meyer, M. Rueda, C. Ferrer, C. Valencia, A. Pérez, X. de la Cruz, J.M. López-Bes, F.J. Luque, M. Orozco, “Datamining of Molecular Dynamics Trajectories of Nucleic Acids”, *Journal of Biomolecular Structure & Dynamics*, vol. 23, 2006, p. 447-455.
- E. Cubero, F.J. Luque, M. Orozco, “Theoretical Study of the Hoogsteen-Watson-Crick Junctions in DNA”, *Biophysical Journal*, vol. 90, 2006, p. 1000-1008.
- M. Rueda, F.J. Luque, M. Orozco, “G-DNA Can Maintain its Structure in the Gas Phase”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 3608-3619.
- T. Meyer, C. Ferrer-Costa, A. Pérez, M. Rueda, A. Bidon-Chanal, F.J. Luque, C.A. Laughton, M. Orozco, “Essential Dynamics: A Tool for Efficient Trajectory Compression and Management”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 2, 2006, p. 251-258.

- J. Sponer, P. Jurecka, I. Marchan, F.J. Luque, M. Orozco, P. Hobza, “Nature of Base Stacking. Reference Quantum Chemical Stacking Energies in Ten Unique B-DNA Base Pairs Steps”, *Chemistry-A European Journal*, vol. 12, 2006, p. 2854-2865.
- J.R. Goñi, J.M. Vaquerizas, J. Dopazo, M. Orozco, “Exploring the Reasons for the Large Density of Triplex-Forming Oligonucleotide Target Sequences in the Human Genome”, *Bmc Genomics*, vol. 7, 2006, p. 63-72.
- I. Soteras, O. Lozano, A. Gómez-Esqué, C. Escolano, M. Orozco, M. Amat, J. Bosch, F.J. Luque, “On the Origin of Stereoselectivity in the Alkylation of Oxazolopiperidone Enolates”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, 2006, p. 6581-6588.
- A. Bidon-Chanal, M. Marí, A. Crespo, M. Milani, M. Orozco, M. Bolognesi, F.J. Luque, D. Estrin, “Ligand-Induced Dynamical Regulation of NO Conversion in Mycobacterium Tuberculosis Truncated-Hemoglobin N”, *Proteins-Structure Function and Genetics*, vol. 64, 2006, p. 457-464.
- M. Fuentes-Cabrera, P. Lipkowski, O. Huertas, B.G. Sumpter, M. Orozco, F.J. Luque, J.C. Wells, J. Leszczynski, “Aromaticity Induced Changes in the Electronic Properties of Size-Expanded DNA Bases. The Case of xC”, *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 106, 2006, p. 2339-2346.
- C. Curutchet, M. Orozco, F.J. Luque, B. Mennucci, J. Tomasi, “Dispersion and Repulsion Contributions to the Solvation Free Energy: Comparison of Quantum Mechanical and Classical Approaches in the Polarizable Continuum Model”, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 27, 2006, p. 1769-1780.
- D. Talavera, A. Morreale, A. Hospital, C. Ferrer, J.L. Gelpí, X. de la Cruz, T. Meyer, R. Soliva, F.J. Luque, M. Orozco, “A Fast Method for the Determination of Fractional Contributions to Solvation in Proteins”, *Protein Science*, vol. 15, 2006, p. 2525-2533.
- C. Ferrer-Costa, M. Orozco, X. de la Cruz, “Characterization of Compensated Mutations in Terms of Structural and Physico-Chemical Properties”, *Journal of Molecular Biology*, vol. 365, 2006, p. 249-256.

Dr. Josep Maria Poblet (URV)

- A. Rodríguez-Forteza, J.M. Campanera, C. Cardona, L. Echegoyen, J.M. Poblet, “Dancing on a Fullerene Surface: Isomerization of Y3N@(N-Ethylpyrrolidino-C80) from the 6,6 to the 5,6 Regioisomer”, *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 45, 2006, p. 8176-8180.
- A. Rodríguez-Forteza, C. Rovira, P. Ordejón, C. Herold, P. Lagrange, E. Canadell, “Electronic Structure and Charge Transfer in the Ternary Intercalated Graphite Beta-KS0.25C3”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45 (23), 2006, p. 9387-9393.
- E. Serrano, C. Vallés, J.J. Carbó, A. Lledós, T. Soler, R. Navarro, E.P. Urriolabeitia, “Mixed P-N and As-N Bis-Ylide Palladium Complexes: Cooperative Intramolecular Interactions, Conformational Preferences, and C-H Bond Activations”, *Organometallics*, vol. 19, 2006, p. 4653-4664.

- A. Rodríguez-Forteza, C. de Graaf, J.M. Poble, “*Ab Initio* and DFT Study of the Exchange Coupling in the Highly Reduced Polyoxoanion $[\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}(\text{VO})_2]^{5-}$ ”, *Chemical Physics Letters*, vol. 428(1-3), 2006, p. 88-92.
- O.A. Kholdeeva, G.M. Maksimov, R.I. Maksimovskaya, M.P. Vanina, T.A. Trubitsina, D.Y. Naumov, B.A. Kolesov, N.S. Antonova, J.J. Carbó, J.M. Poble, “Zr-IV-Monosubstituted Keggin-Type Dimeric Polyoxometalates: Synthesis, Characterization, Catalysis of H_2O_2 -Based Oxidations, and Theoretical Study”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45 (18), 2006, p. 7224-7234.
- L.R. Falvello, J.C. Ginés, J.J. Carbó, A. Lledós, R. Navarro, T. Soler, E.P. Urriolabeitia, “Palladium Complexes of a Phosphorus Ylide with Two Stabilizing Groups: Synthesis, Structure, and DFT Study of the Bonding Modes”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45 (17), 2006, p. 6803-6815.
- X. López, I.A. Weinstock, C. Bo, J.P. Sarasa, J.M. Poble, “Structural Evolution in Polyoxometalates: A DFT Study of Dimerization Processes in Lindqvist and Keggin Cluster Anions”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45 (16), 2006, p. 6467-6473.
- J. Tercero, E. Ruiz, S. Álvarez, A. Rodríguez-Forteza, P. Alemany, “Density Functional Study of Magnetostructural Correlations in Cubane Complexes Containing the Cu_4O_4 Core”, *Journal of Materials Chemistry*, vol. 16 (26), 2006, p. 2729-2735.
- J. Gracia, J.M. Poble, J. Autschbach, L.P. Kazansky, “Density-Functional Calculation of the W-183 and O-17 NMR Chemical Shifts for Large Polyoxotungstates”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 6, 2006, p. 1139-1148.
- J. Gracia, J.M. Poble, J.A. Fernández, J. Autschbach, L.P. Kazansky, “DFT Calculations of the W-183 NMR Chemical Shifts in Reduced Polyoxotungstates”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 6, 2006, p. 1149-1154.
- M. García-Castro, A. Martín, M. Mena, J.M. Poble, C. Yelamos, “Iodine Attack on the Metalloligand $[\{\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\mu\text{-NH})\}_3(\mu_3\text{-N})]$: Surprising Formation of the $[\text{Ti}_3(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_3\text{I}_2(\mu\text{-NH})_3(\text{NH}_3)]^+$ Cation”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 6, 2006, p. 1155-1160.
- A. Rodríguez-Forteza, M. Iannuzzi, M. Parrinello, “*Ab Initio* Molecular Dynamics Study of Heterogeneous Oxidation of Graphite by Means of Gas-Phase Nitric Acid”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 110 (8), 2006, p. 3477-3484.
- X. López, J.A. Fernández, J.M. Poble, “Redox Properties of Polyoxometalates: New Insights on the Anion Charge Effect”, *Dalton Transactions*, vol. 9, 2006, p. 1162-1167.
- J.J. Carbó, A. Lledós, D. Vogt, C. Bo, “Origin of Stereinduction by Chiral Aminophosphane Phosphinite Ligands in Enantioselective Catalysis: Asymmetric Hydroformylation”, *Chemistry-A European Journal*, vol. 12 (5), 2006, p. 1457-1467.
- J.M. Campanera, C. Bo, J.M. Poble, “Exohedral Reactivity of Trimetallic Nitride Template (TNT) Endohedral Metallofullerenes”, *Journal of Organic Chemistry*, vol. 71 (1), 2006, p. 46-54.

Dr. Xavier Querol (CSIC)

- E. Mantilla, N. Castell, R. Salvador, A. Stein, L. Hernández, M. Millán, *Evaluation of Ozone Impact due to New Industrial Facilities in the Southwestern Iberian Peninsula*, 6th Annual Meeting of the European Meteorological Society. 6th European Conference on Applied Climatology, Ljubljana (Slovenia), 4-8 September 2006.
- N. Castell, E. Mantilla, R. Salvador, A. Stein, L. Hernández, M. Millán, *Emission Inventory for a Photochemical Modelling Exercise over the South-west of Spain*, 6th Annual Meeting of the European Meteorological Society. 6th European Conference on Applied Climatology, Ljubljana (Slovenia), 4-8 September 2006.
- R. Salvador, E. Mantilla, N. Castell, A. Stein, L. Hernández, M. Millán, *Analysis of Meteorological Conditions during Photochemical Episodes over South-West of the Iberian Peninsula*, 6th Annual Meeting of the European Meteorological Society. 6th European Conference on Applied Climatology, Ljubljana (Slovenia), 4-8 September 2006.
- E. Mantilla, N. Castell, R. Salvador, *Utilización de modelos CTM para la estimación del impacto fotoquímico debido a nuevas actividades industriales. Metodología*, Congreso V Congreso de la Asociación Española de Climatología, Zaragoza (España), Septiembre 2006.
- N. Castell, E. Mantilla, R. Salvador, *Estimación de las emisiones biogénicas y antropogénicas para un ejercicio de modelización fotoquímica en el sur-oeste de la Península Ibérica*, Congreso V Congreso de la Asociación Española de Climatología en Zaragoza, Zaragoza (España), Septiembre 2006.

Dr. Josep Manel Ricart (URV)

- A. Valcárcel, A. Clotet, F. Illas, J.M. Ricart, "Adsorption Properties and Vibrational Spectra of Propyne Adsorbed on Rh(111). Comparison with Other (111) Metal Surfaces", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 2, 2007, p. 311-317.
- D.L.S. Nieskens, F. Ample, M.M.M. Jansen, D. Curulla, J.M. Ricart, J.W. Niemantsverdriet, "Acetylene Decomposition on Rh(100): Theory and Experiment", *Chemical Physics*, vol. 7, 2006, p. 1068-1074.
- A. Valcárcel, J.M. Ricart, A. Clotet, F. Illas, A. Markovits, C. Minot, "Theoretical Study of Dehydrogenation and Isomerisation Reactions of Propylene on Pt(111)", *Journal of Catalysis*, vol. 241, 2006, p. 115-122.
- G. Novell-Leruth, A. Valcárcel, J. Pérez-Ramírez, J.M. Ricart, "Ammonia Dehydrogenation over Platinum-Group Metal Surfaces. Structure, Stability, and Reactivity of Adsorbed NH_x Species", *J. Phys. Chem. C.*, 2006, p. *In press*.

Dr. Antoni Rius (CSIC)

- D. Pino, J. Vilà-Guerau de Arellano, H.J.J. Jonker, A. Dosio, “Role of the Shear and Inversion Strength During Sunset Turbulence Over Land: Characteristic Length Scales”, *Boundary Layer Meteorology*, vol. 121, 2006, p. 537-556.
- S.W. Kim, S.U. Park, D. Pino, J. Vilà-Guerau de Arellano, “Parameterizations of Entrainment in a Sheared Convective Boundary Layer by Using a First-Order Jump Model”, *Boundary Layer Meteorology*, vol. 120, 2006, p. 455-475.
- D. Pino, S.W. Vilà-Guerau de Arellano, “Representing Sheared Convective Boundary Layer by Zeroth- and First-Order Jump Mixed Layer Models: Large-Eddy Simulation Verification”, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, vol. 45, 2006, p. 1224-1243.
- M.R. Soler, J. Hinojosa, M. Bravo, D. Pino, J. Vilà-Guerau de Arellano, “Analizing the Basic Features of Different Complex Terrain Flows by Means a Doppler Sodar and a Numerical Model: Some Implications to Air Pollution Problems”, *Meteorology and Atmospheric*, vol. 85, 2004, p. 141-154.
- E. López-Baeza, F. Belda, A. Bodas, D. Crommelynck, S. Dewitte, C. Domènech, J.F. Gimeno, J.E. Harries, J. Sánchez, D. Pino, A. Rius, K. Saleh, R. Tarruella, A. Velázquez, *Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere VIII*, SPIE, 2004. ISBN: 0-8194-5118-5.
- D. Pino, J. Vilà-Guerau de Arellano, F. Rocadenbosch, A. Comerón, “The Boundary Layer Growth in an Urban Area”, *Science of the Total Environment*, vol. 334-335, 2004, p. 207-213.
- S. Ortega, M.R. Soler, J. Beneito, D. Pino, “Evaluation of Two Ozone Air Quality Modelling Systems”, *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 4, 2004, p. 1389-1398.
- D. Pino, J. Vilà-Guerau de Arellano, P.G. Duynkerke, “The Contribution of Shear to the Evolution of a Convective Boundary Layer”, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 60, 2003, p. 1913-1926.
- E. Cardellach, G. Ruffini, D. Pino, A. Rius, A. Komjathy, “Mediterranean Ballon Experiment: GPS Reflections for Wind Speed Retrieval from the Stratosphere”, *Remote Sensing of the Environment*, vol. 88, 2003, p. 351-362.
- C. Soriano, M.R. Soler, D. Pino, M. Alarcón, B. Physick, P. Hurley, “Modelling Different Situations in Catalunya, Spain, with MM5 and TAPM Mesoscale Models: a Comparative Study”, *International Journal of Environment Pollution*, vol. 20, 2003, p. 256-268.
- D. Behrend, R. Haas, D. Pino, L.P. Grandinarsky, S.J. Keihm, W. Schwarz, L. Cucurull, A. Rius, “MM5 Derived ZWDs Compared to Observational Results from VLBI, GPS and WVR”, *Physics and Chemistry of the Earth*, vol. 27, 2002, p. 301-308.

Dr. Blai Sanahuja (UB)

- A. Aran, B. Sanahuja, D. Lario, “SOLPENCO: A SOLar Particle ENgineering COde”, *Advances in Space Research*, vol. 37, no. 6, 2006, p. 1240-1246. doi:doi:10.1016/j.asr.2005.09.019.
- R. Vainio, N. Agueda, A. Aran, D. Lario, “Modeling of Solar Energetic Particles in Interplanetary Space”, J. Liliensten, en *Astrophys. and Space Sci. Libr.*, 2006. (Dordrecht:Springer, to be Published).
- A. Aran, B. Sanahuja, D. Lario, “Comparing Proton Fluxes and Fluences of SEP Events with those Predicted by SOLPENCO”, en *36th COSPAR Scientific Assembly*, Held 16-23 July 2006, in Beijing, China, 2006. (Submitted to Adv. Space Res.).
- D. Lario, A. Aran, N. Agueda, B. Sanahuja, “Radial Dependence of Proton Peak Intensities and Fluences in SEP Events: Influence of the Energetic Particle Transport Parameters”, en *36th COSPAR Scientific Assembly*, Held 16-23 July 2006, in Beijing, China , 2006. (Submitted to Adv. Space Res.).
- A. Aran, B. Sanahuja, D. Lario, “A First Step Towards Proton Flux Forecasting”, *Advances in Space Research*, vol. 36, no. 12, 2005, p. 2333-2338. doi:10.1016/j.asr.2004.06.023.
- A. Aran, B. Sanahuja, D. Lario, “Fluxes and Fluences of SEP Events Derived from SOLPENCO”, *Annales Geophysicae*, vol. 23, 2005, p. 3047-3053. SRef-ID: 1432-0576/ag/2005-23-3047.
- A. Aran, B. Sanahuja, D. Lario, *An Engineering Model for Solar Energetic Particles in Interplanetary Space Final Report*, ESA/ESTEC, 2004. Contract 14098/99/NL/MM (extended) .

Dr. Ramón Sayós (UB)

- C. Arasa, F. Busnengo, A. Salin, R. Sayós, “Theoretical Dynamics Study of Atomic Oxygen Over β -cristobalite (100)”, M.S. Ivanov, A.K. Rebrov, en *25th International Symposium on Rarefied Gas*, 2006, p. 1-6.

Dr. José Maria Saá (UIB)

- J.M. Saá, F. Tur, J. González, M. Vega, “Chiral Monometallic Lanthanide (III) Salt Complexes Are Arrayed Acid-Base Networks for Enantioselective Catalysis: the Direct, Nitroaldol (Henry) Reaction”, *Tetrahedron Asymmetry*, vol. 17, 2006, p. 99.
- A. Baeza, J. Casas, C. Nájera, J.M. Sansano, J.M. Saá, “Enantioselective Synthesis of O-Methoxycarbonyl Cyanohydrins: Chiral Building Blocks Generated by Bifunctional Catalysis with BINOLAM-AlCl₃”, *Eur. J. Org. Chem.*, 2006, p. 1949.
- C. Palomo, M. Oiarbide, R. López, P. González, A. Lynden, E. Gómez-Bengoia, J.M. Saá, “Intramolecular Sulfur Transfer in N-Enoyl Oxazolidine-2-Thiones Promoted by

Brønsted Acids. Practical Asymmetric Synthesis of β -Mercapto Carboxylic Acids and Mechanistic Insights”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 128, 2006, p. 15236.

- A. Baeza, C. Nájera, J.M. Sansano, J.M. Saá, “BINOLAM-AlCl₃: A Two-Centre Catalyst for the Synthesis of Enantioenriched Cyanohydrin O-Phosphates”, *Chem. Eur. J.*, vol. 11, 2005, p. 3849.
- A. Baeza, C. Nájera, J.M. Sansano, J.M. Saá, “Asymmetric Synthesis of O-Benzoyl Cyanohydrins by Reaction of Aldehydes with Benzoyl Cyanide Catalysed by BINOLAM-Ti(IV) Complexes”, *Tetrahedron Asymmetry*, vol. 16, 2005, p. 2385.
- M. Capó, J.M. Saá, “A DFT Computational Study on Electrophilic Substitutions Upon α -oxy-Substituted Benzylorganolithium Compounds: Lithium Catalysis is the Hidden Piece of the Puzzle”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, p. 16738.

Dra. Anna Serra (UPC)

- A. Serra, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, “Strengthening and Microstructure Modification Associated with Moving Twin Boundaries in hcp Metals”, *Phil. Mag. Letters*, 2007. *In press*.
- A. Béré, A. Serra, “On the Atomic Structures, Mobility and Interactions of Extended Defects in GaN: Dislocations, Tilt and Twin Boundaries”, *Phil. Mag. A*, vol. 86, 2006, p. 2159-2192.
- R.C. Pond, D.L. Medlin, A. Serra, “A Study of the Accommodation of Coherency Strain by Interfacial Defects at a Grain Boundary in Gold”, *Phil. Mag. A*, vol. 86, 2006, p. 4667-4684.

Dra. Mariona Sodupe (UAB)

- R. Rios-Font, J. Bertran, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe, “Effects of Ionization, Metal Cationization and Protonation on 2'-Deoxyguanosine: Changes on Sugar Puckering and Stability of the N-Glycosidic Bond”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 110, 2006, p. 5767-5772.
- A. Rimola, S. Tosoni, M. Sodupe, P. Uglieng, “Does Silica Surface Catalyse Peptide Bond Formation? New Insights from First-Principles Calculations”, *ChemPhysChem*, vol. 7, 2006, p. 157-163.
- A. Rimola, M. Sodupe, J. Tortajada, L. Rodriguez-Santiago, “Gas Phase Reactivity of Cu⁺-aromatic Amino Acids”, *International Journal of Mass Spectrometry*, vol. 257, 2006, p. 60-69.
- A. Rimola, M. Sodupe, J. Ros, J. Pons, “A Theoretical Study on PdII Complexes Containing Hemilabile Pyrazole-Derived Ligands”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2006, p. 447-454.
- A. Rimola, M. Sodupe, S. Tosoni, B. Civalieri, P. Ugliengo, “Interaction of Glycine with Isolated Hydroxyl Groups at the Silica Surface: First Principles B3LYP Periodic Simulation”, *Langmuir*, vol. 22, 2006, p. 6593-6604.

- A. Rimola, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe, “Cation- π Interactions and Oxidative Effects on Cu^+ and Cu^{2+} Binding to Phe, Tyr, Trp, and His Amino Acids in the Gas Phase. Insights from First-Principles Calculations”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 110, 2006, p. 24189-24199.
- O.K. Poleshchuk, V. Branchadell, B. Brycki, A.V. Fateev, A.C. Legon, “HFI and DFT Study of the Bonding in Complexes of Halogen and Interhalogen Diatomics with Lewis Base”, *Theochem*, vol. 760, 2006, p. 175-182.
- O. Illa, X. Bagan, A.M. Cazorla, C. Lyon, A. Baceiredo, V. Branchadell, R.M. Ortuno, “Reaction of C-Silylated α -Diazophosphines as Nucleophiles Toward Carbonyl 2 Compounds: A Mechanistic Study and Application to the Synthesis of Alkynes and α -Hydroxyphosphonamides”, *Journal of Organic Chemistry*, vol. 71, 2006, p. 5320-5327.
- P. Farras, F. Teixidor, V. Branchadell, “Prediction of pK_a Values of Nido-Carboranes by Density Functional Theory Methods”, *Inorganic Chemistry*, vol. 45, 2006, p. 7947-7954.
- G.P. Aguado, F. Rua, V. Branchadell, P.E. Nielsen, R.M. Ortuno, “Cyclobutyl-Carbonyl Substituted PNA: Synthesis And Study of a Novel PNA Derivative”, *Tetrahedron: Asymmetry*, vol. 17, 2006, p. 2499-2503.
- J. Bertran, L. Blancafort, M. Noguera, M. Sodupe, *Proton transfers in DNA Base Pairs. Potential Mutagenic processes*, vol. 2, Springer, The Netherlands, 2006. Edited by J. Sponer, F. Lankas, F. Dordrecht.
- A. Gil, J. Bertran, M. Sodupe, “Effects of Ionization on N-glycylglycine Peptide: Influence of Intramolecular Hydrogen Bonds”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 124, 2006, p. 154306/154301-154306/154310.
- M. Noguera, L. Blancafort, M. Sodupe, J. Bertran, “Canonical Watson-Crick Base Pair Interactions in $\text{p} \rightarrow \text{p}^*$ Type Triplet States”, *Molecular Physics*, vol. 104, 2006, p. 925-931.
- O.K. Poleshchuk, V. Branchadell, A.V. Fateev, A.C. Legon, “ SO_3 Complexes with Nitrogen Containing Ligands as the Object of Nuclear Quadrupole Interactions and Density Functional Theory Calculations”, *Theochem*, vol. 761, 2006, p. 195-201.

Dr. Albert Solé (UB)

- J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé, “Mechanistic Study of the $\text{CH}_3\text{O}_2\cdot + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2\text{H} + \text{O}_2$ Reaction in the Gas Phase. Computational. Evidence for the Formation of a Hydrogen-Bonded Diradical Complex”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006. 6073-6082.
- J.M. Anglada, S. Olivella, A. Solé, “Hydrogen Transfer Between Sulfuric Acid and Hydroxyl Radical in the Gas Phase: Competition Among Hydrogen Atom Transfer, Proton-Coupled Electron-Transfer, and Double Proton Transfer”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, 2006, p. 1982-1990.

Dr. Francesc Teixidor (CSIC)

- P. Farràs, F. Teixidor, V. Branchadell, “Prediction of pKa Values of *nido*-Carboranes by Density Functional Theory Methods”, *Inorg Chem.*, vol. 45, 2006, p. 7947.

El nombre de referències a publicacions disponibles al web d'aquests últims cinc anys i l'acumulat total és el següent:

	2002	2003	2004	2005	2006	Acumulat
Per institució						
UB	94	66	77	57	66	980
UAB	36	46	51	41	46	424
UPC	15	26	32	15	13	566
UPF	2	4				27
UdG	3	5	2	8	46	128
UdL	5	2	7			48
URV	7	2	7	4	18	77
CSIC	31	16	4		26	361
UIB	13	13			3	88
Altres	15	24	4	8	4	316
Per tipus de publicació						
Articles	197	187	165	121	211	2.556
<i>En proceedings</i>	4	5	16	10	5	165
<i>Proceedings</i>						10
Llibres			1		1	44
Reports tècnics	1	4	2	2		65
Altres publicacions	19	8			5	175
Total	221	204	184	133	222	3.015

Annex V

Els investigadors externs

Aquest annex recull la relació d'investigadors externs al Consorci que han usat el maquinari de supercomputació a càrrec dels programes de mobilitat de la Comissió Europea o del Ministerio de Educación y Ciencia.

Programes de mobilitat

Gràcies al programa de mobilitat HPC-Europa Transnational Access, 21 investigadors han usat hores computacionals al CESCA al 2006. D'aquests, set van realitzar la seva estada a la fi de 2005 i com estableix el programa van disposar de quatre mesos addicionals per finalitzar els càlculs. A continuació es llisten distribuïts per àrea de coneixement i institució amfitriona.

Química teòrica

Antonio Aguilar	<i>Development of Numerical Methodologies for the Quantum Treatment of Elementary Chemical Processes: Exact Hyperspherical Calculation for the Reaction $Li+HF \rightarrow LiF+H$</i>	
Margarita Albertí		
Dept. de Química Física		
UB	Dario de Fazio	IT
	Università di Perugia	IT
	2-11-05 / 28-12-05 (2.699 CPQ, 1.237 Altix)	
	<i>Hyperspherical Partition in Molecular Dynamics Simulations of Benzene-Rare-Gas and Benzen-Alkali-Metal Systems</i>	
	Andrea Lombardi	IT
	Università di Perugia	IT
	19-09-05 / 19-12-05 (1 CPQ)	
Francesc Illas	<i>Magnetic Interaction Between Trapped Electrons on the Surface of Polycrystalline MgO</i>	
Dept. de Química Física & CeRQT		
UB	Jennifer A. Chan	UK
	Imperial College London	UK
	17-10-06 / 16-12-06 (50 Altix, 23 CP, 19 CPQ)	
	<i>Magnetic Properties of Ni and Co Clusters Supported on Both Magnetic and Non-Magnetic Oxide Surfaces: a First Principle Study</i>	
	Fabrizio Cinquini	IT
	Università di Milano-Bicocca	IT
	17-10-05 / 17-12-05 (4.223 Altix)	

	<i>Adsorption and Oxidation of Methoxy on Clean and Oxygen Modified Ru(0001) Surfaces</i>	
	Ana Sofia Pinto	PT
	University of Porto	PT
	5-9-06 / 30-10-06 (181 Altix, 1 CP)	
	<i>Modelling Magnetic Properties of Prussian Blue: Viability of Mixed-PP-PW Approach</i>	
	Jacek Wojdel	PL
	Delft University of Technology	GE
	22-5-06 / 7-7-06 (9.602 Altix)	
Juan José Novoa	<i>A Theoretical Investigation of the Oxidation States of Palladium Complexes and their Role in Catalytic Reactions</i>	
Dept. de Química Física	Gian Pietro Miscione	IT
UB	Università degli Studi di Bologna	IT
	23-10-06 / 17-12-06 (695 CPQ, 428 CP)	
Ramón Reigada	<i>Relaxation in Single Heteropolymer Molecules: from Modes to Energy Landscapes</i>	
Dept. de Química Física	Igor Sokolov	GE
UB	Humboldt Universitaet zu Berlin	GE
	14-9-05 / 14-10-05 (3.510 Altix)	
	<i>Biophysical Studies of Mitochondria Cardiolipin Membrane Properties. Molecular Dynamics Simulation Study</i>	
	Tomek Rog	PL
	Helsinki University of Technology	FI
	5-11-06 / 3-12-06 (821 Altix)	
Ramón Sayós	<i>Ab initio DFT and Quantum Wave Packet Calculations of Nitrogen Reactions over Silica</i>	
Dept. de Química Física	Sinan Akpınar	TR
UB	Firat University	TR
	4-6-06 / 13-9-06 (18.972 Altix, 945 CPQ)	
Lluís Blancafort	<i>CASSCF and CAS-PT2 Studies on the Dehalogenation of Halogen Derivatives of Nucleic Bases in the Excited States</i>	
Institut de Química Computacional	Monika Golebiowska	PL
UdG	University of Gdansk	PL
	16-10-06 / 19-11-06 (798 CP, 38 CPQ)	

	<i>Effect of Water on Hole Transfer in Stacked DNA Nucleobases. A CASSCF/CAS-PT2 Study</i>		
	Anna Sadowska		PL
	University of Gdansk		PL
	16-10-06 / 19-11-06 (181 CPQ , 29 CP)		
Miquel Duran	<i>Local Fields and Macroscopic Nonlinear Susceptibilities of Seven Push-Pull Derivatives in 1,4-dioxane Solution</i>		
Institut de Química Computacional	Heribert Reis		GE
UdG	National Hellenic Research Foundation		GR
	9-1-06 / 20-2-06 (251 CPQ, 14 HP)		
	<i>Symmetric desymmetrization of anhydrides</i>		
	Viktorya Aviyente		ES
	Bogazici University		TR
	4-6-06 / 9-6-06 (771 CPQ, 669 CP)		
Josep Fontcoberta	<i>Simulation of Spin-Polarised Scanning Tunneling Microscopy with Iron-intercalated Carbon Nanotubes</i>		
Institut de Ciència de Materials	Rolf Oettking		GE
CSIC	Technische Universitaet Ilmenau		GE
	6-2-06 / 19-3-06 (3.281 Altix)		
Modelització biomolecular			
Xavier Daura	<i>Description of Partially Unfolded State of PYP Combining a Computational Approach and NMR Data</i>		
IBB	Gloria Fuentes		ES
UAB	Utrecht University		NL
	19-09-05 / 30-10-05 (28.251 Altix)		
Carles Jaime	<i>Computational Modelling of [2]Rotaxanes</i>		
Dept. de Química	Jacek Stolarczyk		PL
UAB	University College Dublin		IE
	10-04-05 / 31-10-05 (1.290 Altix)		
Jordi Villà	<i>What is the Mechanism of the Methylation Process Carried out by DNA- and RNA-MTases? A Computer Simulation Study</i>		
IMIM	Agnieszka Obarska		PL
UPF	International Institute of Molecular and Cell Biology		UK
	8-09-05 / 15-10-05 (51 CPQ)		

Mètodes numèrics en enginyeria

Jesús Carrera	<i>Lattice Boltzmann Simulation</i>	
Dept. d'Enginyeria del Terreny, Cartogràfica i Geofísica UPC	Andreas Yotis NCSR "Demokritos" 14-3-06 / 14-3-06 (1.807 Altix)	GR GR
Eduard Egusquiza	<i>Fluid Structure Interaction in an Axial Fan</i>	
Centre de Diagnòstic Industrial i Fluidodinàmica UPC	Felix Lippold University of Stuttgart 2-5-06 / 18-6-06 (67 CPQ)	GE GE

Altres

Guillaume Houzeaux	<i>Large Eddy Simulation and Direct Numerical Simulation on Unstructured Grids</i>	
Computational Science and Mechanics Team BSC	Sofiane Benhamadouche Electricité de France R&D 2-10-06 / 15-12-06 (36 Altix, 36 CP)	FR FR

Els codis de les màquines usades són els següents:

CPQ	HPC320 / beowulf / GS1280
HP	V2500 / N4000 / rx2600
Altix	Altix 3700 Bx2
CP	CP4000

i els dels països corresponents als dominis de primer nivell:

GE	Alemanya	IT	Itàlia
ES	Espanya	NL	Holanda
FI	Finlàndia	PL	Polònia
FR	França	PT	Portugal
GR	Grècia	UK	Regne Unit
IE	Irlanda	TR	Turquia

L'evolució de visites rebudes per cada institució, per àrea de coneixement i per país de procedència dels visitants del programa HPC-Europa des dels seus inicis l'any 2004 és la següent:

	2004	2005	2006
Visites per institució			
Universitat de Barcelona	4	14	6
Universitat Autònoma de Barcelona	2	4	0
Universitat Politècnica de Catalunya		1	3
Universitat Pompeu Fabra	1	2	
Universitat de Girona	1	3	4
Institut Català d'Investigació Química		1	
Consell Superior d'Investigacions Científiques	2	4	1
Universitat Politècnica de València		1	
Barcelona Supercomputing Center - CNS			1
Parc Científic de Barcelona			1
Visites per àrea de coneixement			
Física		1	1
Química teòrica	7	19	12
Modelització biomolecular	2	5	
Ciències de la Terra	1		
Mètodes numèrics en enginyeria		1	2
Altres		4	1
Visites per país d'origen			
Alemanya		4	3
Àustria	1		
Cuba		1	
Espanya		5	2
França	2	1	1
Grècia		2	1
Holanda		3	
Hongria		1	
Itàlia	3	8	1
Regne Unit	1		1
República Txeca	2		
Romania			1
Polònia		4	4
Portugal	1	1	1
Turquia			1
Total	10	30	16

Accés del MEC

Gràcies a l'ajut per a infraestructures científiques i tecnològiques singulars (ICTS), en el marc del Programa Nacional de Equipamiento e Infraestructura de Investigación Científica y Tecnológica del Ministerio de Educación y Ciencia (MEC), sis investigadors externs al Consorci han pogut tenir accés telemàtic als recursos del Centre.

1. *Autoassociació i clusterització de grans derivats multiindenil d'organoliti (I) i d'organocoure (I)*

José M. Saà 1,55%
Universitat de les Illes Balears 17.680 HC

Fruit de les investigacions del projecte al CESCA *Catalisi enantioselectiva* s'ha conegut la possible capacitat de certs compostos organometàl·lics de metalls (I), com ara liti, coure, etc., per autoassociar-se constituint clústers metàl·lics organitzats en macroestructures esfèriques, quasiesfèriques i macroestructures lineals (possibles metalls orgànics). Per aquest motiu, s'inicia aquest projecte complementari, no previst inicialment, per tal de fer un estudi mecanoquàntic d'aquests materials.

2. *Simulació de l'autoassemblatge de nanoagregats per formar sòlids nanoestructurats i nanocables en nanotubs de carboni*

Ángel Mañanes 0,07%
Universidad de Cantabria 870 HC

La resposta de les nanoestructures a l'acció de diversos agents externs i pertorbacions, com ara la presència de gasos, l'atac químics, la irradiació per làser o la proximitat d'altres nanoestructures, està en l'origen de moltes de les seves possibles aplicacions tecnològiques. En molts casos, però, no es coneixen adequadament els detalls de la interacció de les nanoestructures amb aquests agents externs. En aquest projecte s'usa l'experiència que grups de les universitats de Valladolid, Burgos i Cantàbria tenen en els mètodes actuals de simulació computacional atomística per estudiar els mecanismes d'aquestes interaccions per a algunes nanoestructures d'interès tecnològic, com ara els nanotubs de carboni. Aquests simulacions usen, sobretot, tècniques de dinàmica molecular basades en la Teoria del Funcional de la Densitat.

3. *Estudi teòric de la reactivitat de la base de Schiff del piridoxal-5'-fosfat*

Juan Frau 0,28%
Universitat de les Illes Balears 3.208 HC

El piridoxal-5'-fosfat (PLP) és un cofactor que està associat com a grup prostètic a l'activitat de més d'un centenar d'enzims relacionats amb el metabolisme de les proteïnes. El paper del PLP en el metabolisme de les proteïnes de mamífers fa que sigui essencial en els processos associats a la biosíntesi de l'hemoglobina, i el correcte funcionament dels sistemes immunològic i nerviós, entre altres. Aquest projecte se centra en l'estudi teòric del mecanisme d'aquestes reaccions usant la Teoria del Funcional de la Densitat.

4. *Simulacions 3D magnetohidrodinàmiques (MHD) de CME Solars*

Stefaan Poedts 0,31%
Katholieke Universiteit Leuven 3.603 HC

En aquest projecte es realitzen simulacions numèriques dels inicis i de l'evolució interplanetària de Coronal Mass Ejections (CME, expulsions de matèria des de la corona solar). Aquestes simulacions numèriques són necessàries per millorar el pronòstic del temps espacial. Aquest projecte col·labora amb l'investigador de la UB, Blai Sanahuja.

5. *Simulacions numèriques de la dinàmica i la meteorologia de l'atmosfera de Saturn basades en observacions de la missió Cassini*

Enrique García

0,26%

Observatori Esteve Duran

2.925 HC

Aquest treball forma part d'un projecte de recerca en el qual, a partir de la nova informació que està aportant la missió Cassini a l'òrbita de Saturn, es pretén estudiar experimental i teòricament la dinàmica i la meteorologia de l'atmosfera d'aquest planeta. Des de l'Observatori Esteve Duran es prendran mides de l'atmosfera de Saturn usant les imatges de Cassini i es duran a terme simulacions numèriques amb el codi EPIC per estudiar la meteorologia i l'estructura vertical dels vents en la troposfera superior.

6. *Estudi sobre la formació de galàxies mitjançant simulacions cosmològiques d'alta resolució*

Vicent Quilis

0,34%

Universitat de València

3.847 HC

La cosmologia computacional ha contribuït de forma crucial al coneixement que avui dia es té sobre la formació i l'evolució de les estructures cosmològiques (cúmuls de galàxies, galàxies...). A diferència d'altres branques de la física, en la cosmologia no és possible recrear en un laboratori els fenòmens físics estudiats. Per aquest motiu, els supercomputadors s'han convertit en els laboratoris virtuals on els astrofísics analitzen i posen a prova els models teòrics sobre la formació de l'Univers que han observats. Aquest projecte pretén estudiar un dels temes de major rellevància i actualitat com és la formació de les galàxies, per a la qual cosa usarà el codi MASLET, desenvolupat pel Dr. Quilis.

Annex VI

Les tesis doctorals més consultades

Aquest annex descriu la relació de les 30 tesis doctorals més consultades en general i les tres més consultades⁷ de cada universitat durant l'any 2006. Per cada tesi s'inclou: el títol, el departament i la universitat on s'ha llegit, l'autor i la data de lectura, el director i el tant per mil de consultes rebudes:

- 1. Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*
Comunicació Audiovisual i Publicitat UAB
Autor: Gerardo Javier Macías Cortés 11-02-03
Director: Mario Herreros 3,6‰
- 2. Motor asíncrono trifásico con rotor de chapas en espiral*
Enginyeria Elèctrica UPC
Autor: Ramón M^a Mujal Rosas 14-04-04
Director: Oriol Boix Aragonés 3,3‰
- 3. Ética y razón universal en el pensamiento de Santo Tomás de Aquino*
Filosofia del Dret, Moral i Política UV
Autor: Aquilino Cayuela Cayuela 28-10-02
Director: Jesus Conill Sancho 2,6‰
- 4. Educación del razonamiento lógico matemático en Educación Infantil*
Didàctica de les Ciències Experimentals i la Matemàtica UB
Autora: María Pilar Ruesga Ramos 07-07-03
Directors: Mariela Orozco Hormaza, Joaquim Giménez Rodríguez 2,5‰
- 5. Percepción artificial de dibujos lineales*
Tecnologia UJI
Autora: Ana Piquer Vicent 07-11-03
Director: Pedro Company Calleja 2,3‰

⁷ El nombre de consultes correspon al nombre de vegades que s'ha accedit a la pàgina principal de cada tesi. Aquesta pàgina pot ésser consultada més d'un cop si el lector hi retorna posteriorment, com per exemple, per baixar-se un altre arxiu de la mateixa tesi. Per això, es verifiquen que els accessos a les 30 tesis més consultades siguin majoritàriament d'adreces IP o computadors diferents. Enguany, la tesi més consultada ha rebut 13.339 visites provinents de 9.150 computadors diferents, un 68%; per a les altres 29 tesis, aquest percentatge varia des d'un 83% a un 44%.

Així doncs, en fer aquesta verificació s'ha detectat que una de les tesis que figurava inicialment en aquesta llista era accedida reiterativament i automàticament des de dos dominis. Per això, s'ha eliminat.

6. *Modelización de interruptores eléctricos de potencia*
 Enginyeria Elèctrica UPC
 Autor: Walter Fernando Giménez Gutiérrez 02-06-00
 Directors: Juan Carlos Gómez Targarona, Joaquim Pedra Duran 2,2‰
7. *Características del espermograma y determinación de los niveles sericosde gonadotrofinas al inicio de la espermatogenesis humana en una población de adolescentes de la ciudad de Barranquilla, Colombia 1999-2000*
 Biologia Cel·lular i Fisiologia UAB
 Autor: Jesús Fernando Vásquez Rengifo 30-01-04
 Directors: Eduardo Bustos-Obregon, Josep Egozcue 2,1‰
8. *Análisis de la teoría de las metas de logro y de la autodeterminación en los planes de especialización deportiva de la Generalitat Valenciana*
 Psicobiologia i Psicologia Social UV
 Autor: Enrique Carratalá Sánchez 05-03-04
 Directors: Vicent Carratalá Deval, Jose Fco. Guzman Luján 2,1‰
9. *Sistema de inyección no cartográfico para motores de ciclo otto. Gestión de transitorios*
 Màquines i Motors Tèrmics UPC
 Autor: Ernesto Gutiérrez González 17-01-03
 Director: Jesús Andrés Álvarez Florez 2,0‰
10. *Manteniment integral de motors d'encesa per compressió de cogeneració mitjançant l'anàlisi del lubricant. Validació experimental de nous paràmetres de control*
 Màquines i Motors Tèrmics UPC
 Autor: Josep Ramon González Castro 25-07-01
 Director: Ramon Carreras Planells 2,0‰
11. *Estudio descriptivo del síndrome de alienación parental en procesos de separación y divorcio. Diseño y aplicación de un programa piloto de mediación familiar*
 Psicologia de l'Educació UAB
 Autor: José Ignacio Bolaños Cartujo 09-05-01
 Directors: Juan Luis Linares Fernández, Robert Roche Olivar 1,9‰
12. *Metodología y herramientas UML para el modelado y análisis de sistemas de tiempo real orientados a objetos*
 Electrònica i Computadors UC
 Autor: Julio Luis Medina Pasaje 22-09-05
 Director: José María Drake Moyano 1,8‰
13. *Gastos contables y gastos fiscales en el impuesto sobre sociedades*
 Dret UPF
 Autora: Sonia Martín Albà 28-06-01
 Directora: Antonia Agulló Agüero 1,8‰

14. *Caracterización fluidodinámica de una bomba oleohidráulica de engranajes internos generados por perfiles trocoidales*
 Mecànica de Fluids UPC
 Autor: Pedro Javier Gámez Montero 20-12-04
 Director: Esteban Codina Macia 1,7‰
15. *Microestructura y propiedades mecánicas de compuestos de polipropileno con hidróxido de magnesio y aluminio moldeados por inyección*
 Ciència dels Materials i Enginyeria Metal·lúrgica UPC
 Autor: Cédric Morhain 03-07-01
 Director: José Ignacio Velasco Perero 1,7‰
16. *Estudio de la aplicación de sistemas basados en el conocimiento a la operación de una planta de tratamiento de residuos sólidos urbanos por valorización energética*
 Enginyeria Química, Agrària i Tecnologia Agroalimentària UdG
 Autor: Xavier Llauro Fábregas 17-12-99
 Director: Manuel Poch Espallargas 1,6‰
17. *Propuesta de un modelo de evaluación económica de proyectos educativos*
 Metodologia de les Ciències del Comportament UB
 Autor: Miguel Ripoll Novales 21-12-04
 Directora: M^a Teresa Anguera Argilaga 1,6‰
18. *Historia, sociedad, tecnología y crecimiento de la Red. Una aproximación divulgativa a la realidad más desconocida de Internet*
 Empresa i Tecnologia URL
 Autor: Andreu Veà i Baró 12-09-02
 Director: Jordi Dalmau Royo 1,6‰
19. *Grupo Archigram, 1961-1974. Uma Fábula da técnica*
 Composició Arquitectònica UPC
 Autora: Claudia Pianta Costa Cabral 25-02-02
 Director: José M^a Montaner Martorell 1,5‰
20. *Caracterización termomecánica de aceros inoxidables austeníticos AISI-304*
 Ciència dels Materials i Enginyeria Metal·lúrgica UPC
 Autor: Mohammed El Wahabi 20-03-03
 Directores: José Manuel Prado Pozuelo, Jose Maria Cabrera Marrero 1,5‰
21. *La luz en la Arquitectura. Su influencia sobre la salud de las personas. Estudio sobre la variabilidad del alumbrado artificial en oficinas*
 Construccions Arquitectòniques I UPC
 Autora: Laura Murguia Sánchez 04-11-02
 Directores: Ramon San Martin Paramo, Rafael Serra Florensa 1,5‰

22. *Función y calidad de vida de los pacientes con gonartrosis antes y después de la artroplastia de sustitución. Coste de la gonartrosis según la esperanza de vida y de la cirugía*
 Cirurgia UAB
 Autora: Sílvia Ramón Rona 04-07-01
 Directors: Antonio Navarro, Empar Cuxart 1,5‰
23. *El dibujo arquitectónico: Crisol de intenciones*
 Expressió Gràfica Arquitectònica I UPC
 Autora: M^a Isabel Ruiz Castrillo 24-01-97
 Director: Antonio Millán Gómez 1,5‰
24. *La valoración del daño corporal por accidente de tráfico en el Instituto de Medicina Legal de Castellón, tras la Ley 30 de 1995*
 Medicina Preventiva i Salut Pública, Bromatologia, Toxicologia i Medicina Legal UV
 Autora: M^a José de Luis García 22-09-03
 Directors: Eduardo Murcia Sáiz, Matías Vicente Mendoza 1,4‰
25. *El proceso creativo de la elaboración de guiones radiofónicos publicitarios: la cuña*
 Ciències Socials UAB
 Autora: Carmen María Alonso González 11-07-03
 Director: José María Ricarte Bescós 1,4‰
26. *El control de gestión en organizaciones sin ánimo de lucro: el caso particular de los colegios de economistas de España*
 Economía i Empresa UPF
 Autora: Pilar Soldevila García 05-07-00
 Director: Oriol Amat Salas 1,3‰
27. *Trastorno por déficit de atención con hiperactividad. Evaluación y tratamiento psicológico*
 Personalitat, Avaluació i Tractament Psicològic UB
 Autora: Caterina Calderón Garrido 23-06-03
 Directors: Juan Antonio Amador Campos, Maria Fornis i Santacana 1,3‰
28. *Sistema láser de medida de velocidad por efecto doppler de bajo coste para aplicaciones industriales e hidrodinámicas*
 Teoria del Senyal i Comunicacions UPC
 Autor: David García Vizcaino 29-06-05
 Director: Víctor Federico Dios Otin 1,3‰
29. *Incidencia del derecho en la creación y funcionamiento de las Joint Ventures. Análisis de la organización jurídica de las Joint Ventures en la Unión Europea, con especial referencia a España*
 Dret UPF
 Autora: Christine Pauleau 17-11-00
 Directors: Fernando Cerdà Alberó, Francisco Vicent Chuliá 1,3‰

30. *Aportació al control del convertidor CC/CA de tres nivells*
 Enginyeria Electrònica UPC
 Autor: Salvador Simón Alepuz Menéndez 13-12-04
 Director: Josep Bordonau Farrerons 1,3‰
32. *Síntesis de carboximetilcelulosa (CMC) a partir de pastas de plantas anuales*
 Enginyeria Química URV
 Autora: Claudia Barba Pacheco 28-06-02
 Directors: Xavier Farriol Roigés, Daniel Montané Calaf 1,3‰
38. *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón*
 Tecnologia d'Aliments UdL
 Autor: Jordi Pagan i Gilabert 12-04-96
 Director: Albert Ibarz Ribas 1,3‰
39. *Conocimiento previo, esquemas de género y comprensión lectora del inglés como lengua extranjera*
 Filologia Anglesa UM
 Autora: Piedad Fernández Toledo 11-02-00
 Director: Rafael Monroy Casas 1,3‰
43. *Oclusión e isquemia intestinal agudas: Estudio fisiopatológico y efectos del SMS 201-995 sobre las variaciones morfológicas, bioquímicas y de supervivencia en un modelo experimental*
 Cirurgia UdL
 Autor: Ferran Fuertes Guiró 23-09-96
 Directors: Joan Viñas Salas, G. Bertolini 1,2‰
48. *Calidad total y políticas de recursos humanos en el sector hotelero de Cataluña*
 Gestió d'Empresa URV
 Autor: Evaristo Galeana Figueroa 17-09-04
 Director: Ignasi Brunet Icart 1,2‰
51. *Aislamiento, identificación y conservación de cultivos de bacterias lácticas antagonistas de microbiota contaminante de sangre de matadero*
 Institut de Tecnologia Agroalimentària UdG
 Autora: Lucero Marlene Zamora Rodríguez 20-11-03
 Directores: Carmen Carretero Romay, Dolors Parés Oliva 1,2‰
73. *Incertidumbre en métodos analíticos de rutina*
 Química Analítica i Química Orgànica URV
 Autora: María Alicia Maroto Sánchez 05-12-02
 Directors: Ricard Boqué Martí, Jordi Riu Rusell 1,0‰

74. *El concepto de democracia en A. de TOCQUEVILLE (una lectura filosófico-política de “La Democracia en América”)*
 Filosofía, Sociologia i Comunicació Audiovisual i Publicitat UJI
 Autor: Juan Manuel Ros Cherta 15-06-00
 Directores: Adela Cortina Orts, Vicente Domingo Garcia Marzá 1,0‰
85. *La responsabilidad moral de la empresa. Una revisión de la teoría de Stakeholder desde la ética discursiva*
 Filosofía, Sociologia i Comunicació Audiovisual i Publicitat UJI
 Autora: Elsa González Esteban 21-12-01
 Director: Domingo García-Marzá 1,0‰
99. *El incumplimiento esencial del contrato de compraventa internacional de mercaderías*
 Dret Privat UIB
 Autor: Anselmo Martínez Cañellas 30-11-01
 Director: Guillermo Alcover Garau 0,9‰
102. *Análisis y diseño orientado a objetos de un framework para el modelado estadístico con MLG*
 Psicologia UIB
 Autor: Rafael Jiménez López 05-09-03
 Directores: Josep M^a Losilla Vidal, Alfonso L. Palmer Pol 0,9‰
104. *Habilidades sociales en enfermería: Propuesta de un programa de intervención*
 Psicologia UIB
 Autora: Antonia Pades Jiménez 26-03-04
 Directora: Victòria Aurora Ferrer Pérez 0,9‰
146. *Cálculo y diseño asistido por ordenador de tomas de tierra en instalaciones eléctricas: Una formulación numérica basada en el método integral de elementos de contorno*
 Mètodes Matemàtics i de Representació UDC
 Autor: Ignasi Colominas Ezponda 30-05-95
 Director: Fermín Luis Navarrina Martínez 0,8‰
148. *Diseño del proceso de purificación de estireno mediante adsorción en alúmina*
 Enginyeria Química i Química Inorgànica UC
 Autora: María José Rivero Martínez 15-07-02
 Directores: Raquel Ibáñez Mendizábal, Inmaculada Ortiz Uribe 0,8‰
158. *La producción y la productividad de los factores en la agricultura española, 1752-1935*
 Història Moderna i Contemporània UC
 Autor: Miguel Ángel Bringas Gutiérrez 13-11-98
 Director: Sebastián Coll Martín 0,8‰

189. *La lógica interna de la gimnasia artística masculina (GAM) y estudio etnográfico de un gimnasio de alto rendimiento*
 Geografia i Sociologia UdL
 Autor: Marco Antonio Coelho Bortoleto 05-11-04
 Directors: Carles Feixa Pàmols, Pere Lavega i Burgués, Antoni Costes 0,7‰
196. *La presión laboral tendenciosa (Mobbing)*
 Dret Privat UdG
 Autor: Ramón Gimeno Lahoz 10-12-04
 Director: Eduardo Rojo Torrecilla 0,7‰
282. *Innovació tecnològica, creixement econòmic i economia del coneixement: una aproximació empírica, agregada i internacional a la incorporació del coneixement a l'activitat productiva durant la dècada dels noranta*
 Internet Interdisciplinary Institut (IN3) UOC
 Autor: Joan Torrent i Sellens 29-07-02
 Director: Jordi Vilaseca i Requena 0,6‰
298. *Sociedad y deporte: análisis del deporte en la sociedad y su reflejo en los medios de comunicación*
 Sociologia i Ciència Política de l'Administració UDC
 Autor: Manuel Eduardo González Ramallal 16-01-04
 Director: Vicente González Radio 0,6‰
344. *Partículas, volúmenes finitos y mallas no estructuradas: Simulación numérica de problemas de dinámica de fluidos*
 Mètodes Matemàtics i de Representació UDC
 Autor: Luis Cueto-Felgueroso Landeira 28-06-05
 Director: Ignasi Colominas Ezponda 0,6‰
481. *Estudio de los elementos culturales en las obras de Shakespeare y sus traducciones al español por Macpherson, Astrana y Valverde*
 Filologia Anglesa UM
 Autora: Laura Campillo Arnaiz 08-07-05
 Director: Ángel Luis Pujante Álvarez-Castellanos 0,5‰
651. *La colaboración científica en la psicología social y de la personalidad: Análisis bibliométrico de la revista Journal of Personality and Social Psychology*
 Psicologia Bàsica i Metodologia UM
 Autora: María Peñaranda Ortega 30-03-04
 Directors: Elena Quiñones Vidal, Juan José López García 0,4‰

1.313. *La incorporació de les TIC a l'ensenyament universitari presencial. Descripció, anàlisi i avaluació d'una experiència d'introducció de les TIC en un model d'ensenyament universitari presencial a partir del cas a la FPCEE Blanquerna*

Pedagogia URL
 Autor: Miquel Àngel Prats i Fernández 13-07-04
 Director: Jordi Riera 0,3‰

1.333. *Maltractament en les relacions de parella: estils de personalitat, simptomatologia i ajustament diàdic d'un grup de dones maltractades*

Psicologia URL
 Autora: Montse Davins i Pujols 01-04-05
 Director: Carles Pérez Testor 0,3‰

El nombre de tesis doctorals incorporades anualment al servidor per universitat i l'acumulat total és el següent:

	2002	2003	2004	2005	2006	Acumulat	
Catalunya	492	526	639	689	789	3.424	85%
UB	118	123	122	190	236	798	20%
UAB	257	218	303	242	292	1.456	36%
UPC	72	89	108	111	96	553	14%
UPF	11	21	17	34	26	111	3%
UdG	9	15	61	58	45	200	5%
UdL	3	11	1	24	19	103	3%
URV	21	49	26	27	66	189	5%
UOC	1				1	2	0%
URL			1	3	8	12	0%
Altres comunitats		28	164	195	203	590	15%
UIB		2	3	22	15	42	1%
UV		10	141	126	103	380	9%
UJI		16	20	14	15	65	2%
UC				15	13	28	1%
UM				18	42	60	1%
UDC					15	15	0%
Total	492	554*	803	884*	992	4.014*	100%

* Durant l'any 2006 s'han esborrat 1 tesi entrada l'any 2001 de la UAB, 1 de l'any 2003 de la UAB i 1 de l'any 2005 de la URV.

La distribució percentual de matèries per universitat per a les 30 tesis més consultades enguany, classificades amb 52 matèries, es mostra a la pàgina següent:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Total
UB		2%		4%						6%
UAB	2%	2%		2%		4%				10%
UPC					13%	31%	10%			54%
UPF	2%			6%		2%				10%
UdG						2%				2%
URL	2%			4%		2%				8%
UV		4%				2%				6%
UJI	2%									2%
UC	2%					2%				4%
Total	10%	8%		15%	13%	44%	10%			100%

on la llegenda de matèries és la que segueix:

- | | |
|-------------------------------|------------------------------|
| 0 – Generalitats | 6 - Ciències aplicades |
| 1 - Filosofia i psicologia | 7 - Belles arts |
| 2 - Religió i teologia | 8 - Lingüística i literatura |
| 3 - Ciències socials | 9 - Geografia i història |
| 5 - Ciències pures i naturals | |

Aquesta distribució per a les 992 tesis incorporades enguany, amb 1.461 matèries, és:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Total
Catalunya	3%	2%	0%	11%	23%	27%	3%	3%	3%	75%
UB	0%	1%	0%	3%	4%	7%	1%	1%	1%	18%
UAB	0%	1%	0%	3%	7%	6%	0%	1%	1%	20%
UPC	1%	0%		1%	4%	8%	1%			14%
UPF	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	1%		3%
UdG	0%	0%	0%	1%	2%	2%	0%	0%	0%	6%
UdL	0%	0%		0%	0%	1%	0%			2%
URV	0%	0%	0%	2%	5%	3%	0%	0%	0%	10%
UOC				0%						0%
URL	0%	0%		0%	0%	0%				1%
Altres comunitats	3%	1%		5%	6%	6%	1%	3%	1%	25%
UIB				0%	1%				0%	1%
UV	0%	0%		1%	2%	3%	0%	1%	0%	8%
UJI	0%	0%		1%	1%	0%	0%	0%	0%	3%
UC	0%			0%	0%	0%				2%
UM	2%	1%		2%	1%	2%	0%	2%	1%	9%
UDC				0%	1%	1%				2%
Total	5%	4%	0%	16%	29%	33%	3%	6%	3%	100%

Si s'hi inclouen totes les 4.014 tesis amb les 5.526 matèries, la distribució percentual és:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Total
Catalunya	3%	3%	0%	13%	26%	31%	3%	3%	3%	84%
UB	0%	1%		2%	6%	6%	1%	1%	1%	17%
UAB	0%	1%		6%	9%	9%	0%	1%	1%	28%
UPC	1%	0%		1%	6%	10%	2%	0%	0%	20%
UPF	0%		0%	1%	1%	0%	0%	1%	0%	3%
UdG	0%	0%		1%	2%	2%	0%	0%	0%	6%
UdL				0%	0%	1%	0%	0%	0%	3%
URV	1%	0%		1%	3%	2%		0%	0%	7%
UOC				0%						0%
URL	0%	0%		0%		0%				0%
Altres comunitats	1%	1%	0%	3%	4%	4%	0%	2%	1%	16%
UIB		0%		0%	0%	0%				1%
UV	0%	1%		1%	2%	2%	0%	1%	0%	8%
UJI	0%	0%	0%	1%	0%	0%	0%	0%	0%	3%
UC				0%	0%	0%			0%	1%
UM	1%	0%		1%	0%	1%	0%	1%	0%	4%
UDC					0%	0%				0%
Total	4%	4%	0%	16%	30%	34%	3%	5%	3%	100%

El nombre de consultes durant l'any 2006 s'ha incrementat de 2.211.964 a 3.543.640, un 60%, com a conseqüència de facilitar la indexació de les tesis pel buscador Google i la recopilació de metadades pels proveïdors de servei que utilitzen el protocol de l'Open Archives Initiative (OAI, <http://www.openarchives.org>). Entre el total de 6.588 proveïdors de servei que recopilin metadades del TDX els següents són els 20⁸ que més pàgines descarreguen en ordre descendent:

- 1) Institute for Media and Communications Management (University of St.Gallen, <http://www.mcm.unisg.ch/>).
- 2) Universia (<http://biblioteca.universia.net/>).
- 3) Old Dominion University (<http://www.odu.edu>).
- 4) University of Southampton, Electronics and Computer Science (<http://www.ecs.soton.ac.uk>).
- 5) Bibliotècnica: La biblioteca digital de la UPC (<http://bibliotecnica.upc.es/>).
- 6) Cornell University Computer Science (<http://www.cs.cornell.edu/>).
- 7) Universidad de Chile (<http://www.uchile.cl>).

⁸ Sense tenir en compte les adreces IP de les quals no s'ha pogut resoldre el nom.

- 8) Institut français de recherche pour l'exploitation de la mer (<http://www.ifremer.fr/francais/index.php>).
- 9) Buscador de revistes electròniques del CBUC (<http://sfx.cbuc.es/sfx:lcl3/azlist/default>).
- 10) Minghsin University of Science and Technology (<http://www.must.edu.tw/>).
- 11) The Digital Library Production Service (University of Michigan, <http://www.umdl.umich.edu/>).
- 12) DSpace. E-prints UPC (<https://e-prints.upc.edu/>).
- 13) Madroño, Consorcio de Universidades de la Comunidad de Madrid y de la UNED para la Cooperación Bibliotecaria (<http://madrono.cs.urjc.es/>).
- 14) University of Nottingham (<http://www.nottingham.ac.uk/>).
- 15) Michigan State University Libraries (University of Michigan, <http://www2.lib.msu.edu/>).
- 16) Grainger Engineering Library Information Center at University of Illinois at Urbana-Champaign (<http://gita.grainger.uiuc.edu/registry/ListAllRepos.asp>).
- 17) OhioLINK (<http://www.ohiolink.edu/about/what-is-ol.html>) és un consorci que inclou biblioteques acadèmiques, públiques i especials, i l'State Library of Ohio. El seu objectiu és donar accés fàcil i ràpid a la informació a través de tot l'Estat. Donen servei a més de 600.000 estudiants, professors, investigadors i personal de 85 institucions.
- 18) The National Center for High-Performance Computing (NCHC) in Taiwan (<http://www.nchc.org.tw/>).
- 19) Universitat Rovira i Virgili (<http://teledoc.urv.es/>).
- 20) Universidad Rey Juan Carlos (<http://www.cs.urjc.es/>).

L'evolució percentual de les consultes⁹ realitzades a les tesis de cada institució i l'acumulat total és la següent:

	2002	2003	2004	2005	2006	Acumulat
Catalunya	100%	99%	92%	88%	84%	87%
UB	12%	13%	13%	16%	18%	17%
UAB	22%	22%	28%	29%	27%	28%
UPC	54%	51%	37%	30%	23%	29%
UPF	2%	4%	3%	3%	3%	3%
UdG	4%	2%	2%	3%	3%	3%
UdL	3%	2%	2%	3%	3%	3%

⁹ Els percentatges del 2005 i del 2006 inclouen els accessos automatitzats a les tesis que s'han eliminat de la llista de les més consultades.

	2002	2003	2004	2005	2006	Acumulat
URV	1%	4%	5%	4%	5%	5%
UOC		0%	0%	0%	0%	0%
URL			0%	0%	0%	0%
Altres comunitats		1%	8%	12%	16%	13%
UIB		0%	0%	1%	1%	1%
UV		1%	6%	9%	10%	9%
UJI		1%	2%	2%	2%	2%
UC				0%	1%	1%
UM				0%	1%	1%
UDC					0%	0%
Total	100%	100%	100%	100%	100%	100%

L'evolució històrica de les 30 tesis més consultades des de l'any 2001 és la següent:

Autor (institució)	Data lectura	2002		2003		2004		2005		2006		Total
		#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	
1. G.J. Macías (UAB)	2-03			948	0,3	1	6,6	1	4,7	1	3,6	4,3
2. M. P. Ruesga (UB)	7-03			74	2,5	4	4,2	4	2,9	4	2,5	2,9
3. E. Gutiérrez (UPC)	1-03			3	6,2	2	4,6	5	2,9	9	2,0	2,9
4. J. González (UPC)	7-01	17	6,5	4	5,9	3	4,3	6	2,9	10	2,0	2,9
5. R.M. Mujal (UPC)	4-04					52	1,8	3	3,2	2	3,3	2,8
6. J. Vázquez (UAB)	1-04					1.334	2,0	2	3,8	7	2,1	2,5
7. W. Giménez (UPC)	6-00	30	5,9	22	3,6	11	3,1	11	2,3	6	2,2	2,5
8. A. Piquer (UJI)	11-03					24	2,4	7	2,5	5	2,3	2,3
9. A. Cayuela (UV)	10-02					86	1,6	10	2,3	3	2,6	2,2
10. Ll. Massagués (UPC)	7-01	2	10,8	9	4,9	5	3,7	9	2,3	45	1,2	2,2
11. M. El Wahabi (UPC)	3-03			64	2,7	6	3,5	8	2,4	20	1,5	2,1
12. L. Murguía (UPC)	11-02			2	6,3	9	3,2	20	1,9	21	1,5	2,1
13. J.I. Bolaños (UAB)	5-01	449	0,4	264	1,2	62	1,7	18	2,0	11	1,9	1,9
14. D. Rodríguez (UAB)	7-02			254	1,2	18	2,7	13	2,2	36	1,3	1,8
15. C. Morhain (UPC)	7-01					42	1,9	14	2,2	15	1,7	1,8
16. M. I. Ruiz (UPC)	1-97			464	0,6	15	2,8	21	1,8	23	1,5	1,7
17. M. Pallarès (UPC)	4-02			5	5,7	12	3,0	35	1,5	56	1,1	1,7
18. P. Soldevila (UPF)	7-00	128	2,5	62	2,7	22	2,5	36	1,5	27	1,3	1,6
19. J. Pagan (UdL)	4-96	298	0,9	70	2,6	19	2,6	31	1,6	38	1,3	1,6
20. C. P. Costa (UPC)	2-02					25	2,4	27	1,6	19	1,5	1,6
21. G. Sowilam (UPC)	9-00	8	7,2	28	3,4	29	2,2	40	1,5	54	1,1	1,5
22. A. Capdevila (UPF)	7-02			571	0,5	8	3,4	50	1,4	59	1,1	1,5
23. S. Martín (UPF)	6-01					167	1,2	30	1,6	13	1,8	1,5
24. S. Ruiz (UPC)	10-01	3	8,8	14	4,2	17	2,8	44	1,4	120	0,8	1,5
25. X. Llauró (UdG)	12-99			149	1,8	91	1,5	41	1,4	16	1,6	1,5
26. H. Rosas (UPC)	7-01	11	6,9	44	3,0	26	2,3	45	1,4	71	1,0	1,5

Autor (institució)	Data lectura	2002		2003		2004		2005		2006		Total
		#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	
27. D. Sabillón (UPC)	1-02	45	5,0	10	4,9	7	3,4	88	1,1	181	0,7	1,5
28. R. Bonett (UPC)	12-03			1.250	0,1	14	2,9	37	1,5	66	1,1	1,5
29. E. Mora (UAB)	9-02			90	2,4	10	3,1	32	1,6	136	0,8	1,5
30. P.J. Gámez (UPC)	12-04							15	2,1	14	1,7	1,4

La tesi més consultada dels anys 2004, 2005 i 2006 també és la tesi més consultada en el rànquing acumulat, on també apareix la tesi més consultada d'altres 8 universitats:

1. *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*, de l'autor Gerardo Javier Macías Cortés, dirigida pel Dr. Mario Herreros, presentada en el Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB, llegida el febrer de 2003 i introduïda el novembre de 2003.
2. *Educación del razonamiento lógico matemático en Educación Infantil*, de l'autora María Pilar Ruesga Ramos, dirigida pels Drs. Mariela Orozco Hormaza i Joaquim Giménez Rodríguez, presentada en el Departament de Didàctica de les Ciències Experimentals i la Matemàtica de la UB, llegida el juliol de 2003 i introduïda el juliol de 2003.
3. *Sistema de inyección no cartográfico para motores de ciclo otto. Gestión de transitorios*, de l'autor Ernesto Gutiérrez González, dirigida pel Dr. Jesús Andrés Álvarez Florez, presentada en el Departament de Màquines i Motors Tèrmics de la UPC, llegida el gener de 2003 i introduïda el febrer de 2003.
8. *Percepción artificial de dibujos lineales*, de l'autora Ana Piquer Vicent, dirigida pel Dr. Pedro Company Calleja, presentada en el Departament de Tecnologia de la UJI, llegida el novembre de 2003 i introduïda el febrer de 2004.
9. *Ética y razón universal en el pensamiento de Santo Tomás de Aquino*, de l'autor Aquilino Cayuela Cayuela, dirigida pel Dr. Jesús Conill Sancho, presentada en el Departament de Filosofia del Dret, Moral i Política de la UV, llegida l'octubre de 2002 i introduïda el febrer de 2004.
18. *El control de gestión en organizaciones sin ánimo de lucro: el caso particular de los colegios de economistas de España*, de l'autora Pilar Soldevila García, dirigida pel Dr. Oriol Amat Salas, presentada en el Departament d'Economia i Empresa de la UPF, llegida el juliol de 2000 i introduïda l'abril de 2002.
19. *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón*, de l'autor Jordi Pagan i Gilabert, dirigida pel Dr. Albert Ibarz Ribas, presentada en el Departament de Tecnologia d'Aliments de la UdL, llegida l'abril de 1996 i introduïda l'abril de 2001.

25. *Estudio de la aplicación de sistemas basados en el conocimiento a la operación de una planta de tratamiento de residuos sólidos urbanos por valorización energética*, de l'autor Xavier Llauro Fábregas, dirigida pel Dr. Manuel Poch Espallargas, presentada en el Departament d'Enginyeria Química, Agrària i Tecnologia Agroalimentària de la UdG, llegida el desembre de 1999 i introduïda el gener de 2003.

La tesi més consultada en el rànquing acumulat per cadascuna de la resta d'universitats participants és:

- *Historia, sociedad, tecnología y crecimiento de la Red. Una aproximación divulgativa a la realidad más desconocida de Internet*, de l'autor Andreu Veà i Baró, dirigida pel Dr. Jordi Dalmau Royo, presentada en el Departament d'Empresa i Tecnologia de la URL, llegida el setembre de 2002 i introduïda el novembre de 2004.
- *Síntesis de carboximetilcelulosa (CMC) a partir de pastas de plantas anuales*, de l'autora Claudia Barba Pacheco, dirigida pels Drs. Xavier Farriol Roigés i Daniel Montané Calaf, presentada en el Departament d'Enginyeria Química de la URV, llegida el juny de 2002 i introduïda l'agost de 2002.
- *Análisis y diseño orientados a objetos de un Framework para el modelado estadístico con MLG*, de l'autor Rafael Jiménez López, dirigida pels Drs. Josep M^a Losilla Vidal i Alfonso L. Palmer Pol, presentada en el Departament de Psicologia de la UIB, llegida el setembre de 2003 i introduïda el juliol de 2004.
- *Metodología y herramientas UML para el modelado y análisis de sistemas de tiempo real orientados a objetos*, de l'autor Julio Luis Medina Pasaje, dirigida pel Dr. José María Drake Moyano, presentada en el Departament d'Electrònica i Computadors de la UC, llegida el setembre de 2005 i introduïda el febrer de 2006.
- *Conocimiento previo, esquemas de género y comprensión lectora del inglés como lengua extranjera*, de l'autora Piedad Fernández Toledo, dirigida pel Dr. Rafael Monroy Casas, presentada en el Departament de Filologia Anglesa de la UM, llegida el febrer de 2000 i introduïda el novembre de 2005.
- *Innovació tecnològica, creixement econòmic i economia del coneixement: una aproximació empírica, agregada i internacional a la incorporació del coneixement a l'activitat productiva durant la dècada dels noranta*, de l'autor Joan Torrent i Sellens, dirigida pel Dr. Jordi Vilaseca i Requena, presentada en l'Internet Interdisciplinary Institut de la UOC, llegida el juliol de 2002 i introduïda el desembre de 2002.
- *Cálculo y diseño asistido por ordenador de tomas de tierra en instalaciones eléctricas: Una formulación numérica basada en el método integral de elementos de contorno*, de l'autor Ignasi Colominas Ezponda, dirigida pel Dr. Fermín Luis Navarrina Martínez, presentada en el Departament de Mètodes Matemàtics i de Representació de la UDC, llegida el maig de 1995 i introduïda l'abril de 2006.

Annex VII

Les col·leccions a RECERCAT

Aquest annex descriu la relació de les 36 col·leccions disponibles al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) per a cadascuna de les 13 institucions participants. Per a cada col·lecció es detalla l'any de la seva incorporació i el nombre de documents que conté. En total, són consultables 3.109 documents, un 59% emmagatzemats directament al dipòsit.

Col·leccions per institució	Any	Nombre
Universitat de Barcelona		124
Departament de Biblioteconomia i Documentació: Documents de biblioteconomia i documentació	2005	6
Facultat de Ciències Econòmiques i Empresariales: Documents de treball	2005	118
Universitat Autònoma de Barcelona		728
Centre d'Estudis d'Història de les Ciències: Documents de recerca del CEHIC	2006	6
Centre de Recerca Matemàtica: Prepublicacions del Centre de Recerca Matemàtica	2005	85
Departament d'Economia de l'Empresa: Documents de treball	2005	42
Departament d'Economia i d'Història Econòmica: • Unitat d'Història Econòmica: Documents de treball	2005	30
• Unitat de Fonaments de l'Anàlisi Econòmica: Institut d'Anàlisi Econòmica (CSIC): Working papers	2006	227
Departament d'Economia Aplicada: Documents de treball	2005	72
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria: Projectes i treballs de final de carrera. Enginyeria Química	2005	1
Facultat de Ciències: Projectes i treballs de final de carrera. Ciències ambientals	2005	14
Institut de Ciències Polítiques i Socials: Working papers	2005	251
Universitat Politècnica de Catalunya¹		1.285
• Documents de recerca	2006	180
• Tesines i projectes i treballs de final de carrera	2006	1.105
Universitat Pompeu Fabra		845
Departament d'Economia i Empresa: Economics and Business Working Papers Series	2005	806
Departament de Ciències Polítiques i Socials: • DemoSoc Working Papers	2006	17
• Political theory working papers – Grup de Recerca en Teoria Política	2006	1
Escola Superior Politècnica. Estudis d'Enginyeria de Telecomunicacions: Projectes aplicats d'enginyeria de telecomunicació	2006	2

Col·leccions per institució	Any	Nombre
Institut Universitari de Lingüística Aplicada (IULA):		
• Papers de l'IULA. Informes	2005	9
• Papers de l'IULA. Monografies	2005	10
Universitat de Girona		26
Departament d'Economia: Documents de treball	2006	15
Facultat de Ciències: Projectes de Ciències Ambientals	2006	11
Universitat de Lleida		
Escola Politècnica Superior:		
• Treballs de final de carrera. Enginyeria Tècnica en Informàtica de Gestió	2006	
• Treballs de final de carrera. Enginyeria Tècnica en Informàtica de Sistemes	2006	
Universitat Rovira i Virgili		
Departament d'Economia: Documents de treball del Departament d'Economia	2006	14
Universitat Oberta de Catalunya		
Internet Interdisciplinary Institute (IN3): Projecte Internet Catalunya (PIC)	2006	6
Universitat de Vic		34
Documents de recerca	2005	21
Facultat d'Educació: Treballs de recerca de doctorat	2006	8
Facultat d'Empresa i Comunicació: Treballs de recerca de doctorat	2006	2
Facultat de Ciències Humanes, Traducció i Documentació:		
Treballs de recerca de doctorat	2006	3
Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca		31
Beques i ajuts de recerca a estudiants pregraduats	2006	8
Beques i ajuts de recerca a investigadors postdoctorals	2006	5
Beques i ajuts de recerca a investigadors, en formació, predoctorals	2006	16
Projectes de recerca i altres accions	2006	2
Biblioteca de Catalunya		
Informes tècnics	2006	1
Consorti de Biblioteques Universitàries de Catalunya		
Informes tècnics	2005	12
Centre de Supercomputació de Catalunya		
Informes tècnics	2005	3

¹ Només inclou les metadades recol·lectades via OAI-PMH.

Annex VIII

Les revistes a RACO

Aquest annex descriu la relació de les 116 revistes disponibles al servidor de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) per a cadascuna de les 24 institucions editorials participants. Per a cada revista es detalla el nombre de números publicats disponibles i el d'articles. En total, són consultables 29.610 articles en 2.113 números de revista.

Revistes per institució editorial	Números	Articles
Universitat de Barcelona	66	1.461
BiD: textos universitaris de biblioteconomia i documentació	17	359
Ebre 38: revista internacional de la Guerra Civil, 1936-1939	2	46
Gimbernat	43	1.014
LSC - Llengua, societat i comunicació	4	42
Universitat Autònoma de Barcelona	581	9.889
Anàlisi: quaderns de comunicació i cultura	31	601
Athenea digital	10	301
Catalan Journal of Linguistics	5	55
Catalan Working Papers in Linguistics	4	33
Ciències: revista del professorat de ciències de Primària i Secundària	5	70
Documents d'Anàlisi Geogràfica	43	739
Educar	34	383
Enrahonar: quaderns de filosofia	34	562
Enseñanza de las Ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas	90	1.981
Faventia	49	900
HMiC: Història Moderna i Contemporànea	3	41
Links & Letters	8	153
Locus Amoenus	7	127
Manuscrits. Revista d'història moderna	22	379
Orsis: organismes i sistemes	20	253
Papers. Revista de sociologia	78	1.288
Publicacions de la Secció de Matemàtiques	38	464
Publicacions Matemàtiques	41	639
Quaderns d'Italià	8	171
Quaderns: revista de traducció	13	312
Recerca Musicològica	11	195
Redes: revista hispana para el análisis de redes sociales	10	65
Revibec: Revista iberoamericana de economía ecológica	3	19
Tradumàtica: traducció i tecnologies de la informació i la comunicació	4	31
Treballs d'Arqueologia	10	127

Revistes per institució editorial	Números	Articles
Universitat Politècnica de Catalunya	136	1.045
Annals d'arquitectura	12	140
Arxius de l'ESAB	5	29
Biomecánica: órgano de la Sociedad Ibérica de Biomecánica y Biomateriales	1	14
Carrer de la ciutat: revista de arquitectura	11	116
Cuadernos internacionales de tecnología para el desarrollo humano	5	89
Documentos de la Escuela de Ingenieros Industriales de Barcelona	15	62
Ide@sostenible: espacio de reflexión y comunicación en desarrollo sostenible	14	65
Intangible Capital	13	36
Mathware & soft computing	27	232
Papers de la Càtedra Unesco	12	20
Perspectivas Urbanas	7	55
Quaderns d'història de l'enginyeria	7	112
Sostenible?	7	75
Universitat Pompeu Fabra		
Cuadernos de Arqueología Mediterránea	11	69
Periodística: revista acadèmica ¹	10	107
Universitat de Girona		
Scientia gerundensis	19	501
Universitat de Lleida		
Revista de Geografia	34	348
Universitat Oberta de Catalunya	15	155
Digithum: revista digital d'humanitats	4	40
IDP: revista d'Internet, dret i política	3	36
RUSC: revista de universidad y sociedad del conocimiento	5	59
UOC Papers: revista sobre la societat del coneixement	3	20
Universitat de Vic		
Reduccions: revista de poesia	76	1.322
Generalitat de Catalunya		
Coneixement i societat	11	92
Patronat d'Estudis Osonencs		
Ausa	131	1.174
Reial Acadèmia de Bones Lletres	2	43
Boletín de la Real Academia de Buenas Letras de Barcelona	1	24
Memorias de la Real Academia de Buenas Letras de Barcelona	1	19
Centre de Lectura de Reus		
Revista del Centre de Lectura de Reus	10	140
Institut d'Estadística de Catalunya	79	620
QÜESTIÓ (Quaderns d'Estadística i Investigació Operativa)	73	574
SORT (Statistics and Operations Research Transactions)	6	46

Revistes per institució editorial	Números	Articles
Institut Ramon Muntaner	222	2.402
Aplec de treballs	22	306
Beceroles	2	34
CEP	5	53
Dovella	80	619
Miscel·lània d'estudis santjustencs	12	60
Notes	21	349
Quaderns de la Selva	17	270
Raïls	20	184
Recerca	9	95
Resclosa, La	10	82
Ripacurtia	3	42
Senienc, Lo. Memòria, natura i llengua	1	15
Terme	20	293
Fundació CIDOB	174	2.798
Anuario internacional CIDOB	21	794
DCidob	93	1.160
Revista CIDOB d'afers internacionals	60	844
Centre de Visió per Computador		
ELCVIA: Electronic Letters on Computer Vision and Image Analysis	10	43
Col·legi Oficial de Bibliotecaris - Documentalistes de Catalunya	48	427
Bibliodoc: anuari de biblioteconomia, documentació i informació	6	64
Item: revista de biblioteconomia i documentació	42	363
Institut d'Estudis Catalans	382	4.888
Anuari de la Societat Catalana d'Economia	4	66
Anuari de la Societat Catalana de Filosofia	7	76
Anuari de la Societat Catalana d'Estudis Jurídics	2	26
Arxiu de textos catalans antics	7	95
Ítaca: quaderns catalans de cultura clàssica	8	130
Butlletí de la Institució Catalana d'Història Natural	38	574
Butlletí de la Societat Catalana de Matemàtiques	49	372
Butlletí de la Societat Catalana de Pedagogia	1	14
Butlletí de la Societat Catalana d'Estudis Històrics	14	141
Butlletí de les Societats Catalanes de Física, Química, Matemàtiques i Tecnologia. Segona època	1	4
Cinematògraf	3	64
Contributions to science	9	105
Dossiers agraris	9	97
Educació i Història: revista d'història de l'educació	4	70
Estudis Romànics	10	130
Llengua i literatura	17	384
Miscel·lània litúrgica catalana	14	136

Revistes per institució editorial	Números	Articles
Periodística: revista acadèmica*	10	107
Quaderns agraris	12	69
Revista Catalana de Dret Privat	5	51
Revista Catalana de Musicologia	2	28
Revista Catalana de Pedagogia	3	61
Revista Catalana de Sociologia	20	206
Revista de Dret Històric Català	4	27
Revista de física	12	140
Revista de la Societat Catalana de Química	6	77
Revista de Tecnologia	1	12
Sessió Conjunta d'Entomologia	12	218
Tamid	4	31
TECA. Tecnologia i Ciència dels Aliments	9	115
Treballs de Comunicació	19	308
Treballs de Física	5	26
Treballs de la Societat Catalana de Biologia	7	125
Treballs de la Societat Catalana de Geografia	54	803
Fundació Privada ELISAVA Escola Universitària		
Temes de disseny	26	681
Universitat Ramon Llull		
Trípodos.com: revista digital de comunicació	2	34
Museu de Granollers		
Lauro: revista del Museu de Granollers	26	439
Institut Català d'Antropologia		
Quaderns-e de l'Institut Català d'Antropologia	7	83
Associació de Sociolingüistes de Llengua Catalana		
Treballs de Sociolingüística Catalana	17	283
Centre de Promoció de la Cultura Popular i Tradicional Catalana		
Revista d'Entologia de Catalunya	28	673

*La revista *Periodística* pertany a dues institucions editorials (UPF i IEC).

Annex IX

Les institucions adherides a l'Anella Científica

Al llarg de 2006 l'Anella Científica, basada en tecnologia Gigabit Ethernet, ha incrementat de manera considerable tant el nombre d'institucions com el de punts d'accés, posant de manifest la seva consolidació com a una infraestructura clau per al desenvolupament de l'e-Ciència i la Societat de la Informació a Catalunya.

S'hi han incorporat tres noves institucions: la Fundació Barcelona Media (FBM), a 10 Mbps, que comparteix el punt d'accés de la UPF; el Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona (PRBB) a 100 Mbps i la Fundació Hospital Asil de Granollers (FHAG) a 10 Mbps. També s'ha produït la connexió de dues institucions ja adherides: l'Abadia de Montserrat amb un punt d'accés ADSL de 4 Mbps i el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT) amb dos punts d'accés, un a 1 Gbps i l'altre a 10 Mbps. El nombre total d'institucions adherides és de 57.

També hi ha 11 nous punts d'accés connectats directament a l'Anella: un a 1 Gbps del CIEMAT, dos a 100 Mbps que corresponen al PRBB i al Campus de Bellisens de la URV; dos a 10 Mbps que corresponen al CIEMAT i a l'FHAG i 6 amb tecnologia ADSL (un de la UAB, tres de l'IRTA, un del Centre Unesco de Catalunya i un de l'Abadia de Montserrat). S'han produït les baixes de 3 punts d'accés del CIDEM. En total, el nombre de punts és de 73, un cop comptabilitzades les baixes esmentades.

A més, s'han produït increments de cabal en 12 punts d'accés: la UAB a Bellaterra, d'1 Gbps a 2 Gbps per al projecte LHC del PIC; la URV a Tarragona, de 100 Mbps a 140 Mbps amb un nou port; la UPF de 100 Mbps a 110 Mbps amb un nou port per a l'FBM; el Campus de Tortosa de la URV de dues ADSL a 4 Mbps cadascuna a un únic punt a 34 Mbps; el Campus de Sabadell de la UAB, de 34 Mbps a 100 Mbps amb fibra; cinc centres de la URL i l'ASPB, de 10 a 20 Mbps i l'EUPMT, de 10 a 100 Mbps també amb fibra.

La taula de la pàgina següent mostra totes les institucions adherides a l'Anella Científica, agrupades per la categoria on han estat classificades. Per a cadascuna es proporciona l'acrònim identificador del punt d'accés, el tipus de connexió —local, com per exemple les que arriben al Campus Nord, Giganet o Ethernet, en funció de si la connexió és amb fibra o amb radioenllaç amb la xarxa Giganet d'Al-Pi, punt a punt (PaP) o ADSL— i la velocitat.

Institucions	Acrònim	Connexió	Velocitat
A.1: Universitats públiques i privades, sense afany de lucre			
Universitat de Barcelona	UB	Local (C.N.)	1 Gbps
Universitat Autònoma de Barcelona	UAB	Giganet	1+1 Gbps
• Campus de Sabadell	Sabadell	Ethernet	100 Mbps
• Fundació Institut d'Investigació Germans Trias i Pujol ⁶	IGTP	Ethernet	10 Mbps
• Centre d'Ensenyament Santa Coloma ⁶	CESC	Giganet	10 Mbps
• Centre d'Estudis del Patrimoni Arqueològic de la Prehistòria	Flor de Maig	Frame Relay	2 Mbps
• Fundació Universitària del Bages ⁶	FUB	ADSL	4 Mbps
• Institut de Govern i Polítiques Públiques	IGOP	ADSL	4 Mbps
Universitat Politècnica de Catalunya	UPC	Local (C.N.)	1 Gbps
• Consorci Escola Tècnica d'Igualada ⁶	CETI	Frame Relay	2 Mbps
• Escola Politècnica de Mataró ⁶	EUPMT	Giganet	100 Mbps
Universitat Pompeu Fabra	UPF	Giganet	100 Mbps
• Centre de Regulació Genòmica ⁶	CRG	Local (UPF)	10 Mbps
Universitat de Girona	UdG	Giganet	100 Mbps
• Fundació Universitat de Girona: Innovació i Formació	Mercadal	ADSL	4 Mbps
Universitat Rovira i Virgili	URV	Giganet	140 Mbps
• Campus Tortosa	Tortosa	Ethernet	34 Mbps
• Campus Bellisens	Reus	Giganet	100 Mbps
Universitat de Lleida	UdL	Giganet	100 Mbps
Universitat Oberta de Catalunya	UOC	Giganet	100 Mbps
• Internet Interdisciplinary Institute	IN3	Giganet	100 Mbps
Universitat Ramon Llull	URL		
• Institut Químic de Sarrià	IQS	Giganet	20 Mbps
• Fundació Blanquerna	Blanquerna	Giganet	20 Mbps
• Enginyeria i Arquitectura La Salle	La Salle	Giganet	100 Mbps
• Escola Superior d'Administració i Direcció d'Empreses	ESADE	Giganet	100 Mbps
• Fundació Pere Tarrés	FPT	Giganet	20 Mbps
• Escola Universitària de Turisme Sant Ignasi ESADE	ETSI	Giganet	20 Mbps
• Observatori de l'Ebre	Observatori	ADSL	2 Mbps
• Enginyeria La Salle Tarragona	La Salle TGN	ADSL	4 Mbps
• FundEmi	FUNDEMI	Giganet	20 Mbps
Universitat de Vic	UVic	Ethernet	34 Mbps
Universitat Internacional de Catalunya ⁴	UIC	Ethernet	10 Mbps
Universitat Abat Oliba	AbatOliba	Ethernet	10 Mbps
Escola Superior de Música	ESMUC	Giganet	10 Mbps
Escola Universitària Salesiana de Sarrià	EUSS	Giganet	10 Mbps
Institut Nacional d'Educació Física de Catalunya	INEFC	Giganet	10 Mbps
Instituto de Estudios Superiores de la Empresa ²	IESE	PaP (C.N.)	64 Kbps
A.2: Organismes Públics de Recerca i Grans Instal·lacions Científiques			
Barcelona Supercomputing Center	BSC	Local (C.N.)	1 Gbps
Centre de Supercomputació de Catalunya	CESCA	Local (C.N.)	1 Gbps

Institucions	Acrònim	Connexió	Velocitat
Consorci per a la Construcció, Equipament i Explotació del Laboratori de Llum Sincrotró	CELLS	Giganet	10 Mbps
Centro de Invest. Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas <ul style="list-style-type: none"> • Oficina gestió ITER a Josep Pla • Seu al carrer Gran Via 	CIEMAT	Giganet	1 Gbps
	ITER	Giganet	10 Mbps
CSIC a Catalunya <ul style="list-style-type: none"> • Institut Jaume Almera • Residència d'Investigadors⁶ 	GVia	Giganet	10 Mbps
	CSIC	Local (IEC)	10 Mbps
	IJA	Local (C.N.)	100 Mbps
RI	Local (IEC)	10 Mbps	
A.3: Altres institucions de recerca, sense afany de lucre			
Agència de Salut Pública de Barcelona	ASPB	Giganet	20 Mbps
Centre de Terminologia TERMCAT	TERMCAT	PaP (C.N.)	512 Kbps
Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya	PMT-CTTC	Giganet	20 Mbps
Fundació Barcelona Media	FBM	Local (UPF)	10 Mbps
Centre Tecnològic Forestal de Catalunya ⁴	CTFC	ADSL	4 Mbps
Fundació i2cat, Internet i Innovació Digital a Catalunya	i2CAT	Local (C.N.)	500 Mbps
Institut Cartogràfic de Catalunya	ICC	Giganet	10 Mbps
Institut Català d'Investigació Química ⁴	ICIQ	Ethernet	10 Mbps
Institut de Ciències Fotòniques	PMT-ICFO	Giganet	10 Mbps
Institut de Geomàtica	PMT-IdeG	Giganet	10 Mbps
Institut d'Estadística de Catalunya	IDESCAT	Giganet	10 Mbps
Institut d'Estudis Catalans <ul style="list-style-type: none"> • Seu del carrer Capmany 	IEC	Giganet	10 Mbps
	Capmany	Giganet	10 Mbps
Institut de Recerca en Tecnologies Agroalimentàries <ul style="list-style-type: none"> • Estació Experimental Fundació Mas Badia • Centre d'Aqüicultura • Centre de Tecnologia de la Carn • Centre de Cabrils • Unitat de Cunicultura de Caldes de Montbui • Centre Tecnològic de Gestió Integral de Residus Orgànics • Unitat de Remugants • Nutrició Animal Valls 	IRTA	Giganet	10 Mbps
	Badia	ADSL	4 Mbps
	Aqüicultura	ADSL	4 Mbps
	Monells	ADSL	4 Mbps
	Cabrils	ADSL	4 Mbps
	Cunicultura	ADSL	2 Mbps
	GIRO	ADSL	4 Mbps
	Remugants	ADSL	4 Mbps
Valls	ADSL	2 Mbps	
Parc Astronòmic Montsec ⁴	PAM	Local (UdL)	10 Mbps
A.4: Unitats de recerca hospitalàries			
Consorci Hospitalari de Vic	HGV	Ethernet	16 Mbps
Corporació Sanitària Parc Taulí	CSPT	Ethernet	34 Mbps
Fundació Puigvert	Puigvert	Giganet	10 Mbps
Hospital de la Santa Creu i Sant Pau	SantPau	Giganet	100 Mbps
Hospital Universitari Vall d'Hebron	VHebron	Giganet	100 Mbps
Institut Dexeus	IDexeus	PaP (C.N.)	64 Kbps
Institut de Recerca Oncològica	IRO	PaP (C.N.)	512 Kbps
B.1: Organismes gestors de programes d'R+D+i			
Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial ⁴	CIDEM	Giganet	10 Mbps

• Seu central		Giganet	10 Mbps
• Delegacions de Girona i Tarragona (baixa 1-05)		Giganet	10 Mbps
• Delegació de Lleida (baixa 1-05)		Frame Relay	2 Mbps
Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació	FCRI	Giganet	10 Mbps
B.2: Institucions amb continguts digitals rellevants			
Biblioteca Abadia de Montserrat	AbMontserrat	ADSL	4 Mbps
Biblioteca de Catalunya	BC	Local (IEC)	10 Mbps
Centre UNESCO de Catalunya	UnescoCAT	ADSL	4 Mbps
Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya	CConsultiu	ADSL	4 Mbps
Consorti de Biblioteques Universitàries de Catalunya	CBUC	Local (C.N.)	100 Mbps
Fundació Centre de Documentació Política	CDP	Giganet	10 Mbps
Fundació Gran Teatre del Liceu ⁴	Liceu	Giganet	100 Mbps
Museu de Vilafranca, Museu del Vi Fundació Privada ⁵	Museu del Vi	ADSL	4 Mbps
Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona ³	RACAB		
B.4: Entitats d'especial interès per al sistema d'R+D+i			
Servei Català de la Salut	CatSalut	Giganet	10 Mbps
Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya	XTEC	Giganet	1 Gbps
C.1: Parcs científics i tecnològics			
Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona	PRBB	Giganet	100 Mbps
C.2: Altres unitats hospitalàries			
Fundació Hospital Asil de Granollers ⁵	FHAG	Giganet	10 Mbps

¹ En procés de connexió.

² Pendent de formalitzar el conveni d'adhesió a l'Anella Científica.

³ Actualment sense connexió directa a l'Anella Científica.

⁴ Pendent d'afiliació a RedIRIS.

⁵ Sense sortida a través de RedIRIS.

⁶ Amb conveni d'institució vinculada.

L'evolució històrica de les institucions adherides a l'Anella Científica i del nombre de punts d'accés directament connectats a l'Anella és la següent:

	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
Nre. inst.	35	37	38	41	47	51	54	57
≥ 500					4	6	8	8
100 - 155	3	3	3	3	11	12	11	12
10 - 34	8	11	13	15	16	21	25	27
2 - 4	8	8	6	8	2	3	4	6
< 2	16	15	16	15	14	9	6	4
Nre. punts	16	17	19	27	37	53	66	73
≥ 500					1	2	3	4
100 - 155	1	1	1	1	13	12	12	16
10 - 34	5	8	11	14	17	29	33	32
≤ 4	10	8	7	12	6	10	18	21
Capacitat agregada dels punts d'accés (excepte el del Campus Nord)								
Mbps	190	288	388	502	1.653	2.111	3.730	6.242

Annex X

Els servidors allotjats i hostatjats

El Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS) ha experimentat 12 noves incorporacions (5 allotjaments i 7 hostatges) i 3 baixes, 1 allotjament i 2 hostatges.

Els nous servidors allotjats són un del Consorci de Transferència del Coneixement, un de la Farga i tres del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya. Els hostatjats són el web de FesInternet, un domini del Centre de Terminologia del Català, tres dominis del Centre Unesco de Catalunya, un domini del Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya i un domini del CBUC.

Les baixes han estat un dels servidor allotjat del projecte Nodat i dos hostatges dels dominis de l'Institut Català de Nanotecnologia.

En total, hi ha 16 servidors allotjats i 48 hostatjats.

Institució	Acrònim	Tipus	Servei	Des de
Biblioteca de l'Abadia de Montserrat		H	D, C	1999
		H	W, D, C, BD	2004
Centre de Terminologia del Català	TERMCAT	3 H (+1)	D, C	1998
Centre Tecnològic Forestal de Catalunya	CTFC	A	W	2004
Centre Unesco de Catalunya	UnescoCAT	2 H	W, D, C	2001
		2 H	W, D, L, C	2002
		1 H	W, D, L, C, BD	2004
		3 H	D	2006
Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya	CConsultiu	H	W, D, C	1999
			BD	2004
		H	D	2006
Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya	CBUC	H	W, D, C, L	1997
		H	D	2006
		8 A (+3)		2002
Consorci de Transferència de Coneixement	CTC	A		2006
Generalitat de Catalunya (UR i SI)		H	W, D, BD	2003
	BCU	H	W, C	2000
			BD	2004
	Intercat	H	W	2001
	NODAT	2 A	W	2003
H		W, C, BD	2005	
Estudiar a Catalunya (CIC)		H	W, D, C, BD	2003
		12 H	D	

Institució	Acrònim	Tipus	Servei	Des de
<ul style="list-style-type: none"> • Observatorio para la CiberSociedad • <i>Data warehouse</i> • Asociación Int. Política y Gestión Universitaria • La Farga • Fundació Observatori per a la Societat de la Informació de Catalunya • Fundació puntCAT • FesInternet 	Cibersociedad	H	W, BD	2004
	UNEIX	A	W	2004
		H	BD	
	GPU-AI	H	W, D, C	2004
	LaFarga	2 A (+1)	W	2005
	FOBSIC	H	W, D, C	2005
	puntCAT	A	D	2005
FesInternet	H	W,C	2006	
Institut Català d'Investigació Química	ICIQ	2 H	D	2004
Institut d'Estudis Catalans	IEC	H	W, L	2001
	Cat-Science	H	W, L, C, D	2000
	SCF	H	W,D	1999
Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona	RACAB	H	W, D, C	1998
Universitat Autònoma de Barcelona	EUCEN	H	W, D, C, L	2001
<ul style="list-style-type: none"> • Institut Català de Nanotecnologia 	Nanocat	2H	D	2004-06
Universitat de Barcelona	Infomet	H	W, L	2000
<ul style="list-style-type: none"> • Informació Meteorològica 				
Universitat Ramon Llull	URL	H	W, BD	1999

Codis per als tipus de servei: base de dades (BD), correu (C), domini (D), llistes de distribució (L) i web (W).

L'evolució d'ús d'aquests serveis ha estat la següent:

	2001	2002	2003	2004	2005	2006
Institucions usuàries	17	15	15	16	15	14
Allotjament ¹ (A)	5	8	11	11	12	16
Hostatge web (W)	16	20	22	24	24	25
Hostatge de base de dades (BD)			2	8	10	10
Hostatge de domini ² (D)	15	19	77	81	36	39
Hostatge de correu (C)	7	15	14	20	18	19
Hostatge de llistes de distribució (L)	4	8	4	9	8	8
Servidors allotjats + hostatjats	5+17	8+23	11+82	11+88	12+43	16+48

¹ L'allotjament inclou les màquines dedicades.

² A l'hora de calcular el total de servidors només es comptabilitza 1 per a tots els serveis associats (W, D, C, L i BD) a un únic domini.

Annex XI

Les visites rebudes

Durant l'any 2006, el CESCA ha rebut 9 visites amb un total de 191 persones per familiaritzar-se amb les instal·lacions i serveis del Centre.

Institució		Núm.
FesInternet		24
4-05	IES La Salle de Gràcia	23
	Altres	1
Setmana de la Ciència		127
13-11	IES Joan XXIII	28
14-11	Grup SETI@home Catalunya	25
15-11	IES Montmeló	31
	IES Cirviànum	18
17-11	IES Joan Brudieu	25
Altres		40
23-06	Federico Thomas (IRI)+ 7 integrants de la delegació xinesa (NSCF)	8
22-11	Màster d'Infraestructures de Telecomunicacions La Salle	23
21-12	Màster MTSI esCERT/ICT	9

Annex XII

El sumari dels webs

Aquest annex recull el sumari dels cinc webs corporatius del CESCA: el del propi Centre (www.cesca.es), el del Punt Neutre d'Internet a Catalunya (www.catnix.net), el del servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (www.tdx.cat, www.tesisenxarxa.net) i el del Dipòsit de la Recerca de Catalunya (www.recercat.net) i el de Revistes Catalanes amb Accés Obert (www.raoc.cat).

1. Sumari del web cesca.es

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal cesca.es	SS	14-02-01	18-12-06	18-12-06	18-12-06
0.1	Plana d'entrada amb novetats més recents	SS	14-02-01	18-12-06	18-12-06	22-03-06
0.2	Menús de navegació	JP	23-11-05	18-12-06	18-12-06	18-12-06
1	Qui som?	MH	11-02-97	21-03-06	21-03-06	21-03-06
1.0.1	Memòria d'activitats 2003	RV	06-04-05	06-04-05	--	--
1.0.2	Memòria d'activitats 2004	RV	06-04-05	06-04-05	--	--
1.0.3	Memòria d'activitats 2005	RV	21-03-06	21-03-06		
1.1	Benvinguda	MH	19-03-97	10-10-05	10-10-05	10-10-05
1.2	Els òrgans de govern i assessors	MH	07-03-97	04-05-06	04-05-06	04-05-06
1.2.1	Direcció	CM	31-07-97	15-12-06	15-12-06	15-12-06
1.2.1.1	Exdirectius	SS	31-07-97	10-10-06	10-10-06	10-10-06
1.2.2	Consell de Govern	CM	07-03-97	05-12-06	05-12-06	05-12-06
1.2.3	Comissió Permanent	CM	07-03-97	05-12-06	05-12-06	05-12-06
1.2.4	Comissió Executiva del CATNIX	CM	21-06-99	29-12-06	29-12-06	29-12-06
1.2.5	Comissió Tècnica i Assessora	CM	07-02-06	13-11-06	13-11-06	13-11-06
1.2.6	Comissió Tècnica del CATNIX	CM	21-06-99	29-12-06	29-12-06	29-12-06
1.2.7	CTAC	CM	05-06-97	12-12-06	12-12-06	12-12-06
1.2.8	GUSDF	CM	17-12-97	31-12-06	31-12-06	31-12-06
1.2.9	GUCAP	CM	05-04-00	06-02-06	06-02-06	06-02-06
1.2.10	ECAS	CM	03-03-06	03-03-06	03-03-06	03-03-06
1.2.11	ECAF	SS	16-02-06	16-02-06	16-02-06	16-02-06
1.2.12	Recull de fotos	SS	08-03-02	26-10-06	26-10-06	26-10-06
1.3	Els departaments	CM	08-10-97	29-06-06	29-06-06	29-06-06
1.3.1	Recull de fotos	SS	08-03-02	12-06-06	12-06-06	12-06-06
2	Sistemes	AG	14-02-01	23-06-06	23-06-06	23-06-06
2.1	Supercomputació	AG	03-11-06	03-11-06	03-11-06	--
2.1.1	Maquinari	AG	22-04-96	12-09-06	12-09-06	15-09-06
2.1.1.1	Compiladors	JC	26-04-96	23-09-98	23-09-98	--
2.1.1.2	Llibreries	JC	25-04-96	23-09-98	23-09-98	--
2.1.1.3	Eines de desenvolupament	JC	26-04-96	22-09-98	22-09-98	--
2.1.1.4	Eines de visualització	JC	26-04-96	23-09-98	23-09-98	--
2.1.1.5	Aplicacions	JC	26-04-96	21-05-01	21-05-01	--
2.1.1.6	Visió històrica	AG	14-03-97	15-09-06	15-09-06	15-09-06
2.1.2	Sol·licitud de recursos	JC	29-04-96	06-06-06	06-06-06	06-06-06
2.1.3	Ús de recursos	JC	29-04-96	24-05-06	24-05-06	--
2.1.3.1	L'entorn bàsic de treball	JC	16-05-96	27-05-05	27-05-05	--
2.1.3.1.1	Connexió al maquinari	AG	29-03-05	22-05-06	22-05-06	--
2.1.3.1.2	Modules	IB	23-02-99	29-03-05	29-03-05	--
2.1.3.1.3	Àrees de treball	JC	07-05-96	01-06-05	01-06-05	--
2.1.3.1.4	Límits en l'ús de recursos	JC	09-05-96	01-06-05	01-06-05	--
2.1.3.1.5	Consum per projecte	JC	07-01-97	10-06-98	10-06-98	--
2.1.3.1.6	Cues de <i>batch</i>	JC	13-05-96	01-06-05	01-06-05	--
2.1.3.1.6.1	Les cues de <i>batch</i> disponibles	AG	09-05-96	24-05-06	24-05-06	--
2.1.3.1.6.2	Load Share Facility (LSF)	IB	23-02-99	01-06-05	01-06-05	--
2.1.3.1.7	Política de <i>backups</i>	JC	09-05-96	22-10-04	22-10-04	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
2.1.3.1.8	Política de baixes de codis					
2.1.3.2	L'entorn de desenvolupament	JC	28-05-96	25-04-05	25-04-05	--
2.1.3.2.1	Eines de programació en FORTRAN	JC, MD	28-05-96	26-01-05	26-01-05	--
2.1.3.2.1.1	Adaptor 7.0 HPF	MM	10-11-00	10-11-00	10-11-00	--
2.1.3.2.2	Eines de programació en C	JC, MD	28-05-96	26-01-05	26-01-05	--
2.1.3.2.3	Eina de programació Java	MM	29-08-01	19-03-02	19-03-02	--
2.1.3.2.3.1	IBM Java Development Kit (JDK)	MM	13-05-99	13-05-99	13-05-99	--
2.1.3.2.3.2	HP-UX SDK	MM	25-01-01	11-04-02	11-04-02	--
2.1.3.2.3.3	Compaq J2SDK	MM	28-08-01	11-11-02	11-11-02	--
2.1.3.2.4	La utilitat <i>make</i>	JC	13-05-96	30-12-97	--	--
2.1.3.2.5	Desbrossament i anàlisi de programes	JC	14-05-96	23-02-99	--	--
2.1.3.2.6	Les llibreries numèriques	JC, MD	10-05-96	08-11-04	08-11-04	--
2.1.3.2.6.1	BLAS	SM	10-05-96	30-04-99	--	--
2.1.3.2.6.2	ESSL	AG	10-05-96	10-10-06	10-10-06	--
2.1.3.2.6.3	FFTW	MD	08-11-04	08-11-04	08-11-04	--
2.1.3.2.6.4	LAPACK	SM	10-05-96	30-04-99	--	--
2.1.3.2.6.5	MLIB	IB	30-04-99	30-04-99	--	--
2.1.3.2.6.6	NAG	JC	13-05-96	21-03-02	21-03-02	--
2.1.3.2.6.7	sgimath	SM	03-05-96	03-05-96	--	--
2.1.3.2.7	Les llibreries de paral·lelització	JC	10-09-96	10-05-00	--	--
2.1.3.2.7.1	Alguns conceptes bàsics	SM	13-09-96	13-09-96	--	--
2.1.3.2.7.2	BLACS	SM	10-09-96	10-09-96	--	--
2.1.3.2.7.3	BSPlib	JC	10-03-98	10-03-98	--	--
2.1.3.2.7.4	MPI	JC	12-09-96	10-05-00	--	--
2.1.3.2.7.5	MPICH	JC	10-03-98	27-11-02	27-11-02	--
2.1.3.2.7.6	PARMACS	JC	10-09-96	10-05-00	--	--
2.1.3.2.7.7	PVM	JVM	13-09-96	10-05-00	--	--
2.1.3.2.8	Altres utilitats pel desenvolupament de programari	JC	14-05-96	02-09-99	--	--
2.1.3.3	Programari de supercomputació	AG	03-05-96	26-10-06	26-10-06	--
2.1.3.3.1	ADF	AG	17-07-96	11-11-05	11-11-05	--
2.1.3.3.2	AMBER	AG	03-05-96	20-12-05	20-12-05	--
2.1.3.3.3	AutoDock	JC	11-05-04	11-05-04	11-05-04	--
2.1.3.3.4	CPMD	IB	22-03-05	22-03-05	22-03-05	--
2.1.3.3.5	DL_POLY	AG	11-11-04	30-08-06	30-08-06	--
2.1.3.3.6	GADGET-2	AG	26-10-06	26-10-06	26-10-06	--
2.1.3.3.7	GAMESS	JC	03-05-96	11-12-02	11-12-02	--
2.1.3.3.8	Gaussian	AG	21-05-97	19-10-06	19-10-06	--
2.1.3.3.8.1	Exemples d'execució de Gaussian en mode <i>batch</i>	AG	12-06-96	19-10-06	19-10-06	--
2.1.3.3.9	GROMACS	AG	04-11-04	16-06-06	16-06-06	--
2.1.3.3.10	Jaguar	AG	11-05-00	14-07-06	14-07-06	--
2.1.3.3.11	MOPAC	JC	05-06-96	22-01-98	22-01-98	--
2.1.3.3.11.1	Exemples d'execució de MOPAC en mode <i>batch</i>	JC	13-06-96	26-03-98	26-03-98	--
2.1.3.3.11.2	Utilitats del MOPAC	JC	05-06-96	04-12-97	04-12-97	--
2.1.3.3.12	NAMD	MD	15-03-05	15-03-05	15-03-05	--
2.1.3.3.13	POLYRATE	IB	02-02-01	02-02-01	02-02-01	--
2.1.3.3.14	ORACLE	NM	25-06-97	07-03-00	07-03-00	--
2.1.3.3.15	NCAR Graphics	IB	17-02-99	26-11-02	26-11-02	--
2.1.3.3.16	GAUSS	AG	30-06-06	30-06-06	30-06-06	--
2.1.3.3.17	VMD	IB	31-03-05	13-05-00	13-05-00	--
2.1.3.3.18	GNU Octave	IB	18-01-00	11-01-05	11-01-05	--
2.1.3.3.19	Veritas NetBackup	JC	12-05-00	12-05-00	12-05-00	--
2.1.3.4	Els nostres <i>Benchmarks</i>	IB	06-03-01	07-04-06	07-04-06	--
2.1.3.4.1	03-06 Rendiment de l'Opteron 275 a 2,4 GHz	IB	07-04-06	07-04-06	07-04-06	--
2.1.3.4.2	03-06 Rendiment del DL145 G2	IB	07-04-06	07-04-06	07-04-06	--
2.1.3.4.3	02-05 Rendiment paral·lel de l'Altix 3700	JC	26-04-05	26-04-05	26-04-05	--
2.1.3.4.4	02-05 Rendiment de l'IA-64 a 1,6 GHz	JC	26-04-05	26-04-05	26-04-05	--
2.1.3.4.5	02-05 Rendiment de l'Altix 3700	JC	26-04-05	26-04-05	26-04-05	--
2.1.3.4.6	05-03 Rendiment del GS1280	JC	07-05-96	02-05-03	02-05-03	--
2.1.3.4.7	05-03 Rendiment de l'EV7 a 1,5 GHz	JC	07-05-96	02-05-03	02-05-03	--
2.1.3.4.8	11-02 Actualització de l'ES40: Rendiment per node	JC	07-05-96	02-11-02	02-11-02	--
2.1.3.4.9	11-02 Actualització de l'ES40: Rendiment per processador	JC	07-05-96	02-11-02	02-11-02	--
2.1.3.4.10	09-01 Rendiment per processador	JC	07-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.11	09-01 Rendiment per node	JC	07-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.12	12-00 Rendiment per processador	JC	07-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.13	09-00 G98 paral·lel a les HP	JC	07-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.14	09-00 Rendiment dels "links" de G98	JC	07-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.15	03-00 G98 relatiu al Pentium III	JC	08-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.16	02-00 Rendiment per node	JC	09-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.4.17	08-98 Rendiment per processador	JC	10-05-96	25-01-01	25-01-01	--
2.1.3.5	Les preguntes més freqüents	JC	19-06-96	02-01-07	02-01-07	--
2.1.4	Estadístiques	IB	23-05-97	02-02-06	02-02-06	02-02-06
2.1.4.1	1996	MH	10-03-97	10-03-97	06-03-02	--
2.1.4.2	1997	JC	23-05-97	20-01-98	06-03-02	--
2.1.4.3	1998	JC	23-05-97	04-09-98	06-03-02	--
2.1.4.4	1999	JC	23-05-97	19-01-00	06-03-02	--
2.1.4.5	2000	JC	23-05-97	11-12-00	06-03-02	--
2.1.4.6	2001	JC	23-05-97	20-03-02	20-03-02	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
2.1.4.7	2002	JC	23-05-97	31-01-03	31-01-03	--
2.1.4.8	2003	JC	24-05-97	25-02-04	25-02-04	--
2.1.4.9	2004	JC	23-05-97	14-01-05	14-01-05	--
2.2	Servei de Disseny de Fàrmacs	IB	06-11-06	06-11-06	06-11-06	--
2.2.1	Catalyst	IB	06-11-06	06-11-06	06-11-06	--
2.2.2	Sybyl	JC	30-10-06	30-10-06	30-10-06	--
2.3	Servei d'Emmagatzematge de Dades	IB	06-11-06	06-11-06	06-11-06	--
2.4	Dipòsits i portals	AG	03-11-06	03-11-06	03-11-06	--
2.4.1	Maquinari	AG	06-11-06	02-01-07	02-01-07	--
3	Comunicacions	CP	01-03-01	23-06-06	23-06-06	23-06-06
3.0.1	L'allotjament i hostatge de servidors	CP	01-03-01	19-07-06	19-07-06	--
3.1	Anella Científica	HP	08-07-96	22-11-06	22-11-06	22-11-06
3.1.1	Criteris d'adhesió	HP	23-03-04	17-05-06	17-05-06	--
3.1.2	Modalitats de connexió	HP	01-03-06	01-03-06	01-03-06	--
3.1.3	Procediments d'adhesió	HP	31-03-04	11-07-06	11-07-06	--
3.1.3.1	Formulari de petició d'adreces IPv4	CP	31-03-04	26-10-04	--	--
3.1.3.2	Formulari de petició d'adreces IPv6	CP	31-03-04	26-10-04	--	--
3.1.3.3	Formulari de sol·licitud d'anunci de Xarxes	CP	31-03-04	10-11-04	--	--
3.1.3.4	Formulari de sol·licitud de delegació de zona de DNS...	CP	31-03-04	31-03-04	--	--
3.1.4	Política d'ús	MH	23-03-04	01-03-06	01-03-06	--
3.1.5	Institucions adherides	HP	15-03-06	05-12-06	05-12-06	--
3.1.6	Anella Científica DQDB	CP	15-07-96	01-03-01	01-03-01	01-03-01
3.1.7	Anella Científica ATM	CP	08-07-96	01-03-06	01-03-06	26-03-02
3.2	Serveis addicionals de l'Anella Científica	MIG	12-02-98	11-12-06	11-12-06	11-12-06
3.2.1	Certificació Digital					
3.2.1.1	Què és?	MR, IL	25-05-04	25-05-04	13-09-04	--
3.2.1.2	L'EC-UR	MR	27-05-04	30-12-05	30-12-05	--
3.2.1.2.1	Sol·licitud de CPISR i CPIX	CP	04-05-04	04-05-04	--	--
3.2.1.2.2	Certificat de dades	CP	04-05-04	04-05-04	--	--
3.2.1.2.3	Sol·licitud de CDS	CP	04-05-04	04-05-04	--	--
3.2.1.2.4	Habilitació dels CPISR i CPX	MR	28-06-05	04-05-04	--	--
3.2.1.2.5	Revocació dels CPISR i CPX	CP	04-05-04	04-05-04	--	--
3.2.1.2.6	Revocació de CDS	CP	04-05-04	04-05-04	--	--
3.2.1.3	Documentació	MR	08-06-04	28-06-05	28-06-05	--
3.2.1.4	Certificats	MR	28-05-04	30-12-05	30-12-05	--
3.2.1.5	Eines	MR, IL	11-03-04	29-11-04	29-11-04	--
3.2.1.6	PMF (FAQs)	MR, IL	04-06-04	29-09-04	29-09-04	--
3.2.1.7	Glossari	MR, IL	11-03-04	29-09-04	29-09-04	--
3.2.2	Eduroam					
3.2.2.1	Institucions participants	HP	27-09-05	18-12-06	18-12-06	18-12-06
3.2.2.2	Mètodes d'accés	HP	27-09-05	22-12-05	22-12-05	22-12-05
3.2.2.3	Definicions bàsiques	HP	27-09-05	27-09-05	27-09-05	27-09-05
3.2.2.4	Normativa	HP	27-09-05	27-09-05	27-09-05	27-09-05
3.2.2.5	Preguntes més freqüents	HP	27-09-05	27-09-05	27-09-05	27-09-05
3.3	Nus de RedIRIS a Catalunya	HP	02-07-96	01-03-06	01-03-06	08-03-04
3.4	Estadístiques	CP	01-03-01	02-01-07	02-01-07	--
3.4.1	Estadístiques servidor news	MIG	28-02-01	28-02-01	28-02-01	--
3.4.2	1996	MH	27-02-97	23-10-01	23-10-01	--
3.4.3	1997	MH	27-02-97	23-10-01	23-10-01	--
3.4.4	1998	CP	27-02-97	23-10-01	23-10-01	--
3.4.5	1999	CP	27-02-97	23-10-01	23-10-01	--
3.4.6	2000	CP	27-02-97	23-10-01	23-10-01	--
3.4.7	2001	CP	13-02-02	13-02-02	13-02-02	--
3.4.8	2002	CP	01-03-01	15-01-03	15-01-03	--
3.4.9	2003	MIG, RV	01-03-01	15-01-04	15-01-04	--
3.4.10	2004	MIG, RV	01-03-01	12-01-05	12-01-05	--
3.4.11	2005	CP	01-03-01	16-01-05	16-01-05	--
4	Promoció	SS	14-02-01	12-07-06	12-07-06	12-07-06
4.1	Jornades i seminaris	TV	25-01-06	03-10-06	03-10-06	--
4.1.1	1996	MAN	06-05-96	06-05-96	--	--
4.1.2	1997	MT	06-05-96	11-12-97	--	--
4.1.3	1998	AM	21-12-98	21-12-98	--	--
4.1.4	1999	AM	06-04-99	06-04-99	--	--
4.1.5	2000	AM	25-02-00	23-10-00	--	--
4.1.6	2001	XP	08-05-01	19-11-01	19-11-01	--
4.1.7	2002	XP	13-03-02	05-11-02	05-11-02	--
4.1.8	2003	XP	06-05-03	17-12-03	17-12-03	--
4.1.9	2004	TV	11-02-04	25-11-04	25-11-04	--
4.1.10	2005	SS	25-01-05	20-10-05	20-10-05	21-06-05
4.2	Aula de Noves Tecnologies	SS	26-11-04	16-06-06	16-06-06	--
4.2.1	1996	CG	25-04-97	25-04-97	25-04-97	--
4.2.2	1997	EA	29-04-97	07-11-97	07-11-97	--
4.2.3	1998	CG	15-05-98	15-05-98	15-05-98	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
4.2.4	1999	CG	15-05-98	15-05-98	15-05-98	--
4.2.5	2000	AM	18-10-99	10-04-00	10-04-00	--
4.2.6	2001	TV	14-02-01	18-09-01	18-09-01	--
4.2.7	2002	HP	04-10-02	04-10-02	04-10-02	--
4.2.8	2003	HP	04-10-02	13-06-03	13-06-03	--
4.2.9	2004	TV, IL	04-12-03	22-10-04	22-10-04	--
4.2.10	2005	TV	26-11-04	03-05-05	12-04-05	--
4.3	Conferències	SS	24-02-06	18-12-06	18-12-06	--
4.3.1	1996	CG	10-05-96	22-04-97	22-04-97	--
4.3.2	1997	AM	10-05-96	09-07-97	09-07-97	--
4.3.3	1998	AM	10-05-96	21-12-98	21-12-98	--
4.3.4	1999	AM	10-05-96	12-01-00	12-01-00	--
4.3.5	2000	AM	10-05-96	22-12-00	22-12-00	--
4.3.6	2001	TV, RV	03-05-01	31-12-01	31-12-01	--
4.3.7	2002	TV	18-03-02	10-03-02	10-03-02	--
4.3.8	2003	MH, XP, HP	29-01-03	26-11-03	26-11-03	--
4.3.9	2004	TV	12-01-04	19-11-04	19-11-04	--
4.3.10	2005	EM	03-05-05	05-12-05	05-12-05	--
4.4	Projectes	MH	14-02-01	19-05-05	19-05-05	19-05-05
4.4.1	Cerca de projectes	Dpi	18-12-97	18-12-97	18-12-97	18-12-97
4.4.2	Cerca de visitants	Dpi	18-12-97	18-12-97	18-12-97	18-12-97
4.5	Estadístiques	SS	16-06-97	03-01-07	03-01-07	--
4.5.1	2000	TV	17-06-97	13-09-05	13-09-05	--
4.5.2	2001	AM, TV	16-06-97	28-02-02	28-02-02	--
4.5.3	2002	TV	16-06-97	20-01-03	20-01-03	--
4.5.4	2003	TV	16-06-97	31-12-03	31-12-03	--
4.5.5	2004	TV	17-06-97	31-12-03	31-12-03	--
4.5.6	2005	EM	16-06-97	08-02-06	08-02-06	--
4.6	Teraflop	RC	16-05-96	27-03-06	27-03-06	--
4.6.1	Teraflop 1994	MT	1998	1998	1998	--
4.6.2	Teraflop 1995	MT	1998	1998	1998	--
4.6.3	Teraflop 1996	MT	1998	1998	1998	--
4.6.4	Teraflop 1997	MT	1998	1998	1998	--
4.6.5	Teraflop 1998	MT	1999	1998	1998	--
4.6.6	Teraflop 1999	MT	1999	1999	1999	--
4.6.7	Teraflop 2000	TV	10-02-00	22-02-01	22-02-01	--
4.6.8	Teraflop 2001	TV	14-02-01	09-10-01	09-10-01	--
4.6.9	Teraflop 2002	TV	15-02-02	30-01-03	30-01-03	--
4.6.10	Teraflop 2003	TV	30-01-03	07-11-03	07-11-03	--
4.6.11	Teraflop 2004	TV	30-01-04	22-12-04	22-12-04	--
4.6.12	Teraflop 2005	RV	14-02-05	23-12-05	23-12-05	--
4.6.13	Teraflop 2006	TV	27-03-06	12-12-06	12-12-06	--
5	On som?	RC	16-05-96	13-03-06	13-03-06	13-03-06
6	Novetats	RV	03-04-02	29-12-06	29-12-06	--
6.1	1996	JC	18-07-96	08-01-97	--	--
6.1.1	04/03: Duplicada la potència del Cray	MAN	07-05-96	07-05-96	--	--
6.1.2	16/04: Nova configuració de l'SP2	AM	22-04-96	22-04-96	--	--
6.1.3	22/04: 12 R10000 al CEPBA	MH	22-04-96	22-04-96	--	--
6.1.4	30/04: Noves tarifes per al CESCA	MH	22-04-96	22-04-96	--	--
6.1.5	12/06: Nous noms de les cues	SM	12-06-96	12-06-96	--	--
6.1.6	12/06: Trasllat del CESCA	MH	12-06-96	12-06-96	--	--
6.1.7	26/06: SP2: Duració treballs ampliada	SM	26-06-96	26-06-96	--	--
6.1.8	28/06: Conveni amb Oracle	MH	15-07-96	15-07-96	--	--
6.1.9	09/07: Tarifes per a 1996 i 1997	MH	17-07-96	17-07-96	--	--
6.1.10	15/07: Gaussian 94. Rev. D	AM	15-07-96	15-07-96	--	--
6.1.11	26/07: Conveni amb IBM	MH	10-09-96	10-09-96	--	--
6.1.12	09/09: Actualitzat el PowerChallenge	MH	10-09-96	10-09-96	--	--
6.1.13	12/09: Ampliació de disc a l'SP2	MH	10-09-96	10-09-96	--	--
6.1.14	19/09: 8 nodes més per a l'disk i xdisk (SP2)	MH	19-09-96	19-09-96	--	--
6.1.15	19/09: Nova àrea d' <i>scratch</i> a l'SP2	SM	19-09-96	19-09-96	--	--
6.1.16	01/10: Ampliació d'UC concedides	MH	18-09-96	18-09-96	--	--
6.1.17	08/11: HPF al SP2 i a SGI	SM	08-11-96	12-11-96	--	--
6.1.18	29/11: Renovació de projectes	MH	29-11-96	29-11-96	--	--
6.1.19	04/12: HPF d'IBM també disponible a l'SP2	SM	04-12-96	04-12-96	--	--
6.1.20	05/12: AMBER 4.1 disponible arreu	SM	05-12-96	05-12-96	--	--
6.1.21	11/12: Noves cues paral·leles a l'SP2	SM	11-12-96	11-12-96	--	--
6.2	1997 CAP	JC	21-06-96	1999	1999	--
6.2.1	07/01: Canvis en l'SP2 <i>spscratch</i>	SM	07-01-97	07-01-97	07-01-97	--
6.2.2	07/01: Nova fórmula consum	MH	07-01-97	07-01-97	07-01-97	--
6.2.3	07/01: Formularis modificats	MH	07-01-97	07-01-97	07-01-97	--
6.2.4	03/03: L'Origen 2000 disponible	SM	03-03-97	03-03-97	03-03-97	--
6.2.5	06/03: Consells per als Prog. Mobilitat	MH	06-03-97	06-03-97	06-03-97	--
6.2.6	10/03: GCC disponible a l'SP2	SM	10-03-97	10-03-97	10-03-97	--
6.2.7	11/03: Consulta de manuals on-line a l'SP2	SM	11-03-97	11-03-97	11-03-97	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
6.2.8	12/03: Nova opció de la comanda consum	MM	12-03-97	04-12-97	19-11-97	--
6.2.9	20/03: Hores CIRIT disponibles	MH	20-03-97	04-12-97	04-12-97	--
6.2.10	04/04: Gaussian 94 Rev.1	SM	04-04-97	04-04-97	04-04-97	--
6.2.11	22/04: Actualització de software a l'SP2	SM	22-04-97	22-04-97	22-04-97	--
6.2.12	02/05: Actualització de hardware a l'SP2	SM	02-05-97	13-05-97	13-05-97	--
6.2.13	08/05: Formularis actualitzats	SM	08-05-97	08-05-97	08-05-97	--
6.2.14	08/05: Descripció de projectes	SM	08-05-97	08-05-97	21-05-97	--
6.2.15	20/05: ADF a l'SP2	SM	20-05-97	20-05-97	20-05-97	--
6.2.16	21/05: Més disc a l'SP2	SM	21-05-97	21-05-97	21-05-97	--
6.2.17	21/05: Nova versió de GAMESS	SM	22-05-97	22-05-97	22-05-97	--
6.2.18	30/05: 32 processadors més per a l'O2000	SM	30-05-97	30-05-97	30-05-97	--
6.2.19	03/06: 30 GB més de disc per al CRAY	MH	03-06-97	03-06-97	03-06-97	--
6.2.20	27/06: Nova tarifa per al CRAY	MH	27-06-97	27-06-97	27-06-97	--
6.2.21	03/07: L'espai en disc no es comptabilitza	JC	03-07-97	03-07-97	03-07-97	--
6.2.22	18/09: Accés a l'Origin 2000	MM	18-09-97	18-09-97	18-09-97	--
6.2.23	10/10: Convocatòria de projectes per al 1998	MH	10-10-97	10-10-97	10-10-97	--
6.2.24	20/11: 14 nodes més a la cua 'paralel'	MM	20-11-97	20-11-97	20-11-97	--
6.2.25	26/11: Aturada del Cray Y-MP	JC	26-11-97	26-11-97	26-11-97	--
6.3	1997 COM	CP	17-07-96	18-08-97	17-04-01	--
6.3.1	18/05: Universitat de Lleida	CP	18-04-97	18-04-97	18-04-97	--
6.3.2	26/06: Centre de Física de Benasque	CP	26-06-97	26-06-97	26-06-97	--
6.3.3	09/07: Millora de la connexió amb el CIGCAT	CP	09-07-97	09-07-97	09-07-97	--
6.3.4	22/07: Noves estadístiques	CP	22-07-97	22-07-97	22-07-97	--
6.3.5	18/08: El Joan XXIII a l'Anella	CP	10-10-97	10-10-97	10-10-97	--
6.3.6	12/11: El catàleg del CBUC es trasllada al CESCA	CP	14-11-97	14-11-97	14-11-97	--
6.3.7	01/12: Nou servei de News al CESCA	MIG	01-12-97	01-12-97	01-12-97	--
6.3.8	09/12: L'INEFC de Lleida es connecta a l'Anella	CP	09-12-97	09-12-97	09-12-97	--
6.3.9	25/11: La UB es connecta directament al CESCA	CP	25-11-97	25-11-97	25-11-97	--
6.3.10	15/12: Nou radioenllaç per a la UdG, la URV i la UdL	CP	05-12-97	15-12-97	15-12-97	--
6.3.11	17/12: La UPC també es connecta al CESCA	CP	17-12-97	17-12-97	17-12-97	--
6.4	1998 CAP	JC	1998	1998	1998	--
6.4.1	02/01: Cerca Programes de Mobilitat de la UE	AM	02-01-98	02-01-98	02-01-98	--
6.4.2	19/01: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	19-01-98	19-01-98	19-01-98	--
6.4.3	29/01: Unichem 4.0 disponible	JC	29-01-98	29-01-98	29-01-98	--
6.4.4	01/02: Oracle 8.0 disponible	OM	01-02-98	01-02-98	01-02-98	--
6.4.5	02/02: Història de la fórmula consum	MH	02-02-98	02-02-98	02-02-98	--
6.4.6	18/02: Consells per als Programes de Mobilitat	MH	06-03-97	18-02-98	17-11-98	--
6.4.7	02/03: Utilitat flex disponible al SP2	JC	02-03-98	02-03-98	02-03-98	--
6.4.8	02/03: BSPlib disponibles al SP2	JC	02-03-98	02-03-98	02-03-98	--
6.4.9	02/03: MPICH disponible a l'SP2	JC	02-03-98	02-03-98	02-03-98	--
6.4.10	04/03: Intelligent Miner a disposició dels usuaris	Dpi	04-03-98	04-03-98	04-03-98	--
6.4.11	13/03: Nova tarifa per a la CIRIT	MH	13-03-98	13-03-98	13-03-98	--
6.4.12	21/04: IBM discontinua el PVMe	JC	21-04-98	21-04-98	21-04-98	--
6.4.13	29/04: Autoconf, m4 i info de GNU a l'SP2	JC	29-04-98	29-04-98	29-04-98	--
6.4.14	07/05: Als usuaris de l'Origin2000	JL, (CEPBA)	07-05-98	07-05-98	07-05-98	--
6.4.15	08/05: Nou equipament adquirit	MH,JC	08-05-98	08-05-98	08-05-98	--
6.4.16	03/06: Disponibilitat del SP2 i el V2250	JC	03-06-98	03-06-98	30-06-98	--
6.4.17	22/06: Canvi en la gestió del Pool9 a l'SP2	JC	22-06-98	22-06-98	22-06-98	--
6.4.18	30/06: L'O2000 i l'SP2 s'actualitzen	JC	30-06-98	30-06-98	30-06-98	--
6.4.19	31/07: Posada en servei del V2250	JC	31-07-98	31-07-98	31-07-98	--
6.4.19.1	31/07: HP Exemplar V2250: Guia de l'usuari	JC	31-07-98	31-07-98	31-07-98	--
6.4.20	01/09: Convocatòria de projectes per al 1999	MM	16-09-98	16-09-98	16-09-98	--
6.4.21	22/09: Noves utilitats a l'HP V2250	JC	22-09-98	22-09-98	22-09-98	--
6.4.22	23/09: L'SP2 sincronitza els rellotges amb l'INTP	JC	23-09-98	23-09-98	23-09-98	--
6.4.23	11/11: Nova àrea d' <i>scratch</i> / <i>hpscratch</i> a l'HP V2250	JC	11-11-98	11-11-98	11-11-98	--
6.4.24	23/11: Gaussian 98 disponible	JC	23-11-98	23-11-98	23-11-98	--
6.4.25	03/12: L'HP V2250 plenament operatiu	JC	03-12-98	03-12-98	03-12-98	--
6.5	1998 COM	CP	1998	1998	1998	--
6.5.1	27/04: Ampliació contracte de Telefónica	CP	27-04-98	27-04-98	27-04-98	--
6.5.2	29/05: La nova Anella Científica és ja operacional	MIG	29-05-98	29-05-98	29-05-98	--
6.5.3	01/07: Centre de Física de Benasque	MIG	01-07-98	01-07-98	01-07-98	--
6.5.4	08/07: L'H.G.V canvia la seva connexió a l'A.C	CP	08-07-98	08-07-98	08-07-98	--
6.5.5	01/09: El TERMCAT millora la seva connectivitat	CP	01-09-98	01-09-98	01-09-98	--
6.5.6	01/09: Serveis addic. de l'A.C: proxy-caché i ftp mirròr	CP	01-09-98	01-09-98	01-09-98	--
6.5.7	15/09: La RACAB es connecta a la Xarxa	MIG	15-09-98	15-09-98	15-09-98	--
6.5.8	15/10: La UB es connecta amb ATM a 155 Mbps	CP	15-10-98	15-10-98	15-10-98	--
6.5.9	19/10: Augmenta l'enllaç amb els EUA	CP	19-10-98	19-10-98	19-10-98	--
6.5.10	05/11: La UPC es connecta amb ATM a 155 Mbps	CP	05-11-98	05-11-98	05-11-98	--
6.5.11	21/12: L'XTEC a l'Anella Científica	CP	21-12-98	21-12-98	21-12-98	--
6.6	1999 CAP	JC	1999	1999	1999	--
6.6.1	12/01: Consells per als Programes de Mobilitat	MH	06-03-97	12-01-99	12-01-99	--
6.6.2	13/01: UniChem 4.1 accessible	JC	13-01-99	13-01-99	13-01-99	--
6.6.3	14/01: Documentació en format HTML en l'SP2	JC	06-03-97	14-01-99	14-01-99	--
6.6.4	19/01: Nova versió de GAMESS	JC	19-01-99	19-01-99	19-01-99	--
6.6.5	21/01: Nou algorisme per balancejar la càrrega <i>batch</i>	JC	21-01-99	21-01-99	21-01-99	--
6.6.6	21/01: Jaguar disponible a l'HP	JC	21-01-99	21-01-99	21-01-99	--
6.6.7	12/02: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	12-02-99	12-02-99	12-02-99	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
6.6.8	15/02: Catalyst 4.0 disponible	JC	15-02-99	15-02-99	15-02-99	--
6.6.9	17/02: NCAR Graphics instal·lat	JC	17-02-99	17-02-99	17-02-99	--
6.6.10	22/02: Actualització de les NAG: Mark18	JC	22-02-99	22-02-99	22-02-99	--
6.6.11	04/03: MARC disponible a l'HP	JC	04-03-99	04-03-99	04-03-99	--
6.6.12	11/03: Gaussian98 fins a 2GB a l'HP	JC	11-03-99	11-03-99	11-03-99	--
6.6.13	13/03: Oferta de treball per Assistència tècnica	JC	15-03-99	15-03-99	17-09-99	--
6.6.14	19/04: CASTEP disponible a l'IBM SP2	JC	19-04-99	19-04-99	19-04-99	--
6.6.15	03/05: Adaptor 6.1 a l'IBM SP2 i a l'HP V2250	JC	03-05-99	03-05-99	03-05-99	--
6.6.16	03/05: 32 nodes a la cua 'paralel' de l'IBM SP2	JC	03-05-99	03-05-99	03-05-99	--
6.6.17	26/04: Bancs de memòria defectuosos a l'HP V2250	JC	26-04-99	06-05-99	06-05-99	--
6.6.18	25/03: Upgrade de l'HP V2250 amb el patch	JC	25-03-99	25-03-99	06-05-99	--
6.6.19	13/05: IBM JDK 1.1.6 instal·lat a l'IBM SP2	JC	13-05-99	13-05-99	13-05-99	--
6.6.20	14/05: Oracle Developer/2000 instal·lat a l'IBM SP2	JC	14-05-99	14-05-99	14-05-99	--
6.6.21	16/06: GAMESOL disponible a l'IBM i a l'HP	JC	16-06-99	16-06-99	16-06-99	--
6.6.22	24/08: Llibreries OpenGL instal·lades a l'IBM SP2	JC	24-08-99	24-08-99	24-08-99	--
6.6.23	30/08: Objectivity/DB C++ & Java Database Developer 5.1	JC	30-08-99	30-08-99	30-08-99	--
6.6.24	30/08: Correccions Y2K a l'HP V2250	JC	30-08-99	30-08-99	30-08-99	--
6.6.25	30/08: HP V2250 configurat com a <i>Trusted System</i>	JC	30-08-99	30-08-99	30-08-99	--
6.6.26	02/09: Manuals en línia a l'HP V2250	JC	02-09-99	02-09-99	02-09-99	--
6.6.27	02/09: PGLOT disponible a l'IBM SP2	JC	02-09-99	02-09-99	02-09-99	--
6.6.28	15/09: Convocatòria de projectes per al 2000	JC	15-09-99	15-09-99	15-09-99	--
6.6.29	20/09: Nou equipament al CESCA	JC	20-09-99	04-11-99	04-11-99	--
6.6.30	28/09: L'N4000 en fase de proves	JC	28-09-99	28-09-99	28-09-99	--
6.6.31	07/10: Nova cua <i>free</i>	JC	07-10-99	07-10-99	07-10-99	--
6.6.32	22/11: Nova versió del GCC	JC	22-11-99	22-11-99	22-11-99	--
6.6.33	30/11: Amber 50 disponible a totes les màquines	JC	30-11-99	30-11-99	30-11-99	--
6.6.34	14/12: Gaussian 98 Rev. A.7 disponible	JC	14-12-99	14-12-99	14-12-99	--
6.7	1999 COM	CP	1999	1999	1999	--
6.7.1	14/01: La Salle i l'IQS es passen a la fibra	CP	14-01-99	14-01-99	14-01-99	--
6.7.2	26/02: Noves estadístiques del servidor Proxy	MIG	26-02-99	26-02-99	26-02-99	--
6.7.3	12/03: Noves estadístiques del servidor de News	CP	12-03-99	12-03-99	12-03-99	--
6.7.4	15/04: L'IB es connecta a la Xarxa Científica	CP	16-04-99	16-04-99	16-04-99	--
6.7.5	04/05: La fibra òptica arriba a la UAB	CP	27-05-99	27-05-99	27-05-99	--
6.7.6	06/05: El CIGCSA es passa a la fibra	CP	12-05-99	12-05-99	12-05-99	--
6.7.7	04/06: Tres institucions, operatives al punt neutre	CP	04-06-99	04-06-99	04-06-99	--
6.7.8	23/06: El SCS incrementa la seva connexió a 2Mbps	CP	23-06-99	23-06-99	23-06-99	--
6.7.9	04/07: Centre de Física de Benasque	CP	07-07-99	07-07-99	07-07-99	--
6.7.10	09/07: L'IRTA augmenta la seva connexió	CP	09-07-99	09-07-99	09-07-99	--
6.7.11	15/07: Noves institucions connectades al CATNIX	CP	20-07-99	20-07-99	20-07-99	--
6.7.12	16/07: Ampliació de la línia directa amb als EUA	CP	16-07-99	16-07-99	16-07-99	--
6.7.13	22/09: Ampliació serveis FTP anònim i <i>proxy-cache</i>	CP	21-09-99	21-09-99	21-09-99	--
6.7.14	28/09: ESADE augmenta la seva connexió	ES	28-09-99	28-09-99	28-09-99	--
6.7.15	22/10: Nou servidor amb línia directa als EUA	CP	22-10-99	22-10-99	22-10-99	--
6.7.16	23/11: L'Abadia de Montserrat, nova incorporació	CP	23-11-99	23-11-99	23-11-99	--
6.7.17	25/11: El CCGC modifica la seva connexió	CP	01-12-99	01-12-99	01-12-99	--
6.7.18	23/12: 53 institucions connectades a l'AC	CP	23-12-99	23-12-99	23-12-99	--
6.7.19	23/12: La UdG millora la seva connexió	CP	23-12-99	23-12-99	23-12-99	--
6.8	2000 CAP	JC	2000	2000	2000	--
6.8.1	4/1: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	18-01-00	18-01-00	18-01-00	--
6.8.2	18/1: Nova versió de gmake a l'IBM SP2	JC	18-01-00	18-01-00	18-01-00	--
6.8.3	18/1: Octave 2.0.15 a l'IBM SP2	JC	18-01-00	18-01-00	18-01-00	--
6.8.4	20/1: Nova versió de Perl a les HP	JC	20-01-00	20-01-00	20-01-00	--
6.8.5	18/2: Acord CESCA-CESGA-CICA	MH	18-02-00	18-02-00	18-02-00	--
6.8.6	17/2: Editor emacs disponible a les HP	JC	17-02-00	17-02-00	17-02-00	--
6.8.7	23/2: Oracle8 a l'IBM SP2	JC	23-02-00	23-02-00	23-02-00	--
6.8.8	28/2: AMBER 6.0 disponible	JC	28-02-00	28-02-00	28-02-00	--
6.8.9	3/3: Concessió hores CIRIT	MH	03-03-00	03-03-00	03-03-00	--
6.8.10	7/3: Oracle8 a les HP	JC	07-03-00	07-03-00	07-03-00	--
6.8.11	10/3: Consells per sol·licitar estància als P.Mob.	MH	06-03-97	20-11-01	20-11-01	--
6.8.12	8/3: HP discontinua el FORTRAN 77	JC	08-03-00	08-03-00	08-03-00	--
6.8.13	16/3: GrADS 1.7 i NetPBM 7 a l'IBM SP2	JC	16-03-00	16-03-00	16-03-00	--
6.8.14	16/3: VCG i Graphviz a les HP	JC	16-03-00	16-03-00	16-03-00	--
6.8.15	16/3: Tcl i Tk 8.0.3 disponibles a les HP	JC	16-03-00	16-03-00	16-03-00	--
6.8.16	31/3: Java 2 instal·lat a HP V2500/N4000	JC	31-03-00	31-03-00	31-03-00	--
6.8.17	3/4: Convocatòria d'hores per a CESGA i CICA	MH	03-04-00	03-04-00	03-04-00	--
6.8.18	11/4: Seguretat i nova UMASK	JC	11-04-00	11-04-00	11-04-00	--
6.8.19	12/4: Nova versió 5.2.1 d'Objectivity/DB	JC	12-04-00	12-04-00	12-04-00	--
6.8.20	11/5: Jaguar 4.0 disponible a l'HP V2500	JC	11-05-00	11-05-00	11-05-00	--
6.8.21	15/5: Concessió d'hores per al CESGA i el CICA	JC	15-05-00	15-05-00	15-05-00	--
6.8.22	19/5: Hores usades a l'IBM SP2	MH	19-05-00	19-05-00	19-05-00	--
6.8.23	7/6: Secure Shell a l'IBM SP2 i les HP	JC	07-06-00	07-06-00	07-06-00	--
6.8.24	29/9: Convocatòria de projectes per al 2001	MH	15-09-00	27-10-00	27-10-00	--
6.8.25	7/9: Oferta d'una plaça per un curs de SUN al CESGA	JC	07-09-00	07-09-00	07-09-00	--
6.8.26	24/10: Molden 3.6 disponible	JC	24-10-00	24-10-00	24-10-00	--
6.8.27	24/10: Nova versió de f90 a les HP	JC	24-10-00	24-10-00	24-10-00	--
6.8.28	25/10: Password Cracker v5.0	JC	25-10-00	25-10-00	25-10-00	--
6.8.29	26/10: ADF2000 disponible a l'IBM SP2	JC	26-10-00	26-10-00	26-10-00	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
6.8.30	10/11: Nova versió ADAPTOR 7.0 a les HP	JC	10-11-00	10-11-00	10-11-00	--
6.8.31	01/12: Gaussian 98 Rev A.9 disponible	JC	01-12-00	01-12-00	01-12-00	--
6.8.32	12/12: Nova Feature "Disc 12 Gb" a l'IBM SP2	JC	12-12-00	12-12-00	12-12-00	--
6.8.33	20/10: D Zentralblatt MATH replicada al CESCA	JC	20-12-00	20-12-00	20-12-00	--
6.8.34	29/12: MySQL disponible a HP	JC	29-12-00	29-12-00	29-12-00	--
6.9	2000 COM	MIG	2000	2000	2000	--
6.9.1	4/1: L'HSP augmenta la seva velocitat	CP	04-01-00	04-01-00	04-01-00	--
6.9.2	21/2: L'IEC modifica la seva connexió	CP	21-02-00	21-02-00	21-02-00	--
6.9.3	2/3: La URV millora la seva connexió	CP	02-03-00	02-03-00	02-03-00	--
6.9.4	7/3: L'EUSS augmenta la seva velocitat d'accés	CP	07-03-00	07-03-00	07-03-00	--
6.9.5	23/3: L'ICC modifica la seva connexió	CP	23-03-00	23-03-00	23-03-00	--
6.9.6	24/3: La FCDP es connecta a l'AC	CP	31-03-00	31-03-00	31-03-00	--
6.9.7	3/4: La UdL millora la seva connexió a l'AC	CP	03-04-00	07-04-00	07-04-00	--
6.9.8	24/5: BT Telecomunicacions, operatiu al CATNIX	CP	25-05-00	25-05-00	25-05-00	--
6.9.9	29/5: Es busca tècnic de comunicacions	CP	29-05-00	29-05-00	29-05-00	--
6.9.10	4/6: 1er. aniversari del CATNIX	MH	04-06-00	04-06-00	04-06-00	--
6.9.11	30/6: Centre de Ciències de Benasc	CP	04-06-00	04-06-00	04-06-00	--
6.9.12	4/9: Nou servidor de News al CESCA	CP	04-09-00	04-09-00	04-09-00	--
6.9.13	28/9: La UIB s'agermana al nostre proxy	CP	02-10-00	02-10-00	02-10-00	--
6.9.14	10/10: L'Institut de Geomàtica s'incorpora a l'AC	CP	10-10-00	10-10-00	10-10-00	--
6.9.15	27/10: El CDES Abat Oliba, nova alta a l'AC	CP	27-10-00	27-10-00	27-10-00	--
6.10	2001	CP	2001	2001	2001	--
6.10.1	Gener 2001	JC, MH, TV	12-01-01	31-01-01	31-01-01	--
6.10.2	Febrer 2001	IB, JC, TV,	01-02-01	28-02-01	28-02-01	--
6.10.3	Març 2001	TV	02-03-01	23-03-01	23-03-01	--
6.10.4	Abril 2001	CP, JC, TV	17-04-01	27-04-01	27-04-01	--
6.10.5	Maig 2001	JC, MH, TV	03-05-01	31-05-01	31-05-01	--
6.10.6	Juny 2001	JC, TV	06-06-01	18-06-01	18-06-01	--
6.10.7	Juliol 2001	JC, TV	02-07-01	24-07-01	24-07-01	--
6.10.8	Agost 2001	JC, TV	01-08-01	31-08-01	31-08-01	--
6.10.9	Setembre 2001	TV	13-09-01	19-09-01	19-09-01	--
6.10.10	Octubre 2001	JC, MR, TV	01-10-01	30-10-01	30-10-01	--
6.10.11	Novembre 2001	JC, TV	06-11-01	28-11-01	28-11-01	--
6.10.12	Desembre 2001	IB, JC, TV,	05-12-01	28-12-01	28-12-01	--
6.11	2002	TV	2002	2002	2002	--
6.11.1	Gener 2002	JC, TV, CM	03-01-02	28-01-02	28-01-02	--
6.11.2	Febrer 2002	MH,CP,TV,JC	13-02-02	28-02-02	28-02-02	--
6.11.3	Març 2002	TV	05-03-02	25-03-02	25-03-02	--
6.11.4	Abril 2002	MH,TV,CM	02-04-02	26-04-02	26-04-02	--
6.11.5	Maig 2002	TV	07-05-02	28-05-02	28-05-02	--
6.11.6	Juny 2002	TV, MM	01-06-02	26-06-02	26-06-02	--
6.11.7	Juliol 2002	CM,IB, TV	03-07-02	13-01-03	13-01-03	--
6.11.8	Agost 2002	MM	23-08-02	23-08-02	23-08-02	--
6.11.9	Setembre 2002	JC, IB, TV	02-09-02	27-09-02	27-09-02	--
6.11.10	Octubre 2002	XP, JC	01-10-02	31-10-02	31-10-02	--
6.11.11	Novembre 2002	HP, TV, JC	01-11-02	29-11-02	29-11-02	--
6.11.12	Desembre 2002	JC, XP	11-12-02	30-12-02	30-12-02	--
6.12	2003	TV	2003	2003	2003	--
6.12.1	Gener 2003	XP	21-01-03	30-01-03	30-01-03	--
6.12.2	Febrer 2003	MH, JC	10-02-03	27-02-03	27-02-03	--
6.12.3	Març 2003	HP	12-03-03	12-03-03	12-03-03	--
6.12.4	Abril 2003	MH, HP	03-04-03	23-04-03	23-04-03	--
6.12.5	Maig 2003	JC, HP, MM	07-05-03	28-05-03	28-05-03	--
6.12.6	Juny 2003	TV	10-06-03	30-06-03	30-06-03	--
6.12.7	Juliol 2003	TV	04-07-03	25-07-03	25-07-03	--
6.12.8	Agost 2003	TV	04-08-03	04-08-03	04-08-03	--
6.12.9	Setembre 2003	MH, TV	08-09-03	22-09-03	22-09-03	--
6.12.10	Octubre 2003	JC, IB, TV	01-10-03	30-10-03	30-10-03	--
6.12.11	Novembre 2003	TV	15-09-03	15-09-03	15-09-03	--
6.12.12	Desembre 2003	TV	04-12-03	30-12-03	30-12-03	--
6.13	2004	TV	2004	2004	2004	--
6.13.1	Gener 2004	JC, TV	13-01-04	30-01-04	30-01-04	--
6.13.2	Febrer 2004	MH, JC, HP	04-02-04	26-02-04	26-02-04	--
6.13.3	Març 2004	MH, TV	03-03-04	31-03-04	31-03-04	--
6.13.4	Abril 2004	TV	29-04-04	30-04-04	30-04-04	--
6.13.5	Maig 2004	JC, TV	06-05-04	18-05-04	18-05-04	--
6.13.6	Juny 2004	JC, TV	02-06-04	29-06-04	29-06-04	--
6.13.7	Juliol 2004	TV	28-07-04	29-07-04	29-07-04	--
6.13.8	Setembre 2004	JC, TV, MD	01-09-04	22-09-04	22-09-04	--
6.13.9	Octubre 2004	MH, JC, TV,	01-10-04	27-10-04	27-10-04	--
6.13.10	Novembre 2004	MH, TV, IL	01-11-04	29-11-04	29-11-04	--
6.13.11	Desembre 2004	MH, TV	13-12-04	23-11-04	23-11-04	--
6.14	2005	RV	28-12-05	28-12-05	28-12-05	--
6.14.1	Gener 2005	JC, MD, TV,	01-01-05	26-01-05	26-01-05	--
6.14.2	Febrer 2005	MH, CM, TV,	01-02-05	24-02-05	24-02-05	--
6.14.3	Març 2005	CM, TV, IB	01-03-05	31-03-05	31-03-05	--
6.14.4	Abril 2005	MH, IB	06-04-05	29-04-05	29-04-05	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
6.14.5	Maig 2005	EM	04-05-05	30-05-05	30-05-05	--
6.14.6	Juny 2005	TV, EM	01-06-05	22-06-05	22-06-05	--
6.14.6.1	Recull de fotos TAC	SS	17-10-05	17-10-05	17-10-05	--
6.14.7	Juliol 2005	EM	01-07-05	29-07-05	29-07-05	--
6.14.8	Agost 2005	EM	18-08-05	18-08-05	18-08-05	--
6.14.9	Setembre 2005	TV	12-09-05	29-09-05	29-09-05	--
6.14.10	Octubre 2005	MR	10-10-05	25-10-05	25-10-05	--
6.14.10.1	Recull de fotos JOCS	SS	19-10-05	19-10-05	19-10-05	--
6.14.11	Novembre 2005	AG	20-10-05	29-11-05	29-11-05	--
6.14.11.1	Recull de fotos TSIUC	SS	12-12-05	12-12-05	12-12-05	--
6.14.12	Desembre 2005	SS	28-12-05	28-12-05	28-12-05	--
6.15	2006	SS	24-01-06	29-12-06	29-12-06	--
6.15.1	Gener 2006	SS	02-01-06	24-01-06	24-01-06	--
6.15.2	Febrer 2006	SS	06-02-06	20-02-06	20-02-06	--
6.15.3	Març 2006	TV	03-03-06	30-03-06	30-03-06	--
6.15.3.1	Recull de fotografies Inauguració nova e-infraestructura càlcul...	SS	16-03-06	16-03-06	16-03-06	--
6.15.4	Abril 2006	SS	06-04-06	26-04-06	26-04-06	--
6.15.5	Maig 2006	SS	08-05-06	30-05-06	30-05-06	--
6.15.6	Juny 2006	SS	01-06-06	30-06-06	30-06-06	--
6.15.6.1	Recull de fotos TAC	SS	14-06-06	14-06-06	14-06-06	--
6.15.7	Juliol 2006	TV	04-07-06	31-07-06	31-07-06	--
6.15.8	Agost 2006	SS	01-08-06	01-08-06	01-08-06	--
6.15.9	Setembre 2006	TV	01-09-06	29-09-06	29-09-06	--
6.15.10	Octubre 2006	SS	02-10-06	31-10-06	31-10-06	--
6.15.11	Novembre 2006	SS	02-11-06	27-11-06	27-11-06	--
6.15.11.1	Recull de fotos SDF	SS	13-12-06	13-12-06	13-12-06	--
6.15.11.2	Recull de fotos TSIUC	SS	09-11-06	09-11-06	09-11-06	--
6.15.12	Desembre 2006	SS	01-12-06	29-12-06	29-12-06	--
7	Agenda	SS	24-01-06	18-12-06	18-12-06	18-12-06
7.1	1997	CG	10-05-96	09-07-97	09-07-97	--
7.2	1998	AM	10-05-96	09-07-97	09-07-97	--
7.3	1999	AM	10-05-96	20-01-99	20-01-99	--
7.4	2000	AM	10-05-96	22-12-00	22-12-00	--
7.5	2001	TV, XP	07-03-01	14-12-01	14-12-01	14-12-01
7.6	2002	XP	07-03-01	20-11-02	20-11-02	20-11-02
7.7	2003	XP	18-12-02	31-12-03	31-12-03	31-12-03
7.8	2004	XP	02-12-03	13-12-04	13-12-04	13-12-04
7.9	2005	EM	30-11-04	05-12-05	05-12-05	05-12-05
8	Enllaços d'interès	TV	14-06-00	29-12-06	29-12-06	29-12-06
9	Mapa del web	RV	14-02-01	29-03-06	29-03-06	08-06-05
10	Accessibilitat	JP	30-06-05	16-11-06	16-11-06	16-11-06
11	Avis legal	HP	2005	30-06-05	30-06-05	30-06-05
12	Nadales	MP	18-12-06	18-12-06	18-12-06	18-12-06
12.1	2001	CF	05-12-01	05-12-01	05-12-01	05-12-01
12.2	2002	SM	02-12-02	02-12-02	02-12-02	02-12-02
12.3	2003	MT	02-12-03	02-12-03	02-12-03	02-12-03
12.4	2004	MD	17-12-04	17-12-04	17-12-04	17-12-04
12.5	2005	RV	20-12-05	20-12-05	20-12-05	20-12-05

2. Sumari del web *catnix.net*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal <i>catnix.net</i>	RC	02-12-05	02-12-05	02-12-05	02-12-05
1	Qui som?	MH, TV	26-07-99	27-06-05	27-06-05	27-06-05
1.1	Benvinguda	MP	26-07-99	18-10-06	18-10-06	18-10-06
1.2	Els participants	CP	27-06-05	29-12-06	29-12-06	29-12-06
1.4	Els òrgans de govern	MH, TV	26-07-99	02-09-02	02-09-02	02-09-02
2	La infraestructura	CP	26-07-99	29-12-06	29-12-06	29-12-06
2.1	Requisits de connexió	MH	07-04-99	25-01-06	25-01-06	25-01-06
2.2	Serveis addicionals	MIG	17-10-01	03-03-06	03-03-06	03-03-06
2.3	Estadístiques	CP	12-01-00	29-12-06	29-12-06	29-12-06
3	Novetats	CP	26-07-99	29-12-06	29-12-06	29-12-06
4	On som?	MR	26-07-99	01-06-05	01-06-05	01-06-05
5	Enllaços d'interès	CP	26-07-99	29-12-06	29-12-06	29-12-06
6	Accessibilitat	MR	06-10-05	06-10-05	06-10-05	06-10-05
7	Avis legal	HP	21-11-05	21-11-05	21-11-05	21-11-05

3. Sumari del web *tdx.cat*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Gallec	Anglès
0	Pàgina principal <i>tdx.cat</i>	MN	19-05-04	22-11-05	22-11-05	27-11-06	22-11-05
0.1	Menú de seccions	MN	19-05-04	22-11-05	22-11-05	27-11-06	22-11-05
0.2	Menú de navegació	MN	19-05-04	22-11-05	22-11-05	27-11-06	22-11-05
1	Què és?	MH, SR	21-05-04	14-11-05	14-11-05	27-11-06	14-11-05
2	Cerca	MN	19-05-04	22-11-05	22-11-05	27-11-06	22-11-05
3	Estadístiques	MN					
3.1	Tesis incorporades per universitat	MN	17-11-04	31-12-05	31-12-05	27-11-06	31-12-05
3.2	Tesis distribuïdes per matèria i universitat	MN	05-11-04	31-12-05	31-12-05	27-11-06	31-12-05
3.3	Tesis consultades de cada universitat	MN	04-10-04	31-12-05	31-12-05	27-11-06	31-12-05
3.4	Consultes per país/domini i universitat	MN	04-11-04	31-12-05	31-12-05	27-11-06	31-12-05
3.5	Les 25 tesis més consultades aquest any	MN	27-04-04	31-12-05	31-12-05	27-11-06	31-12-05
3.6	L'evolució del TDX (2001-05)	MN	05-04-06	05-04-06	05-04-06	27-11-06	--
3.7	Les tesis més consultades el 2005	MN	30-03-06	30-03-06	30-03-06	27-11-06	--
3.8	Les tesis més consultades el 2004	MN	25-04-05	12-04-05	25-04-05	27-11-06	--
3.9	Les tesis més consultades el 2003	MN	05-11-04	20-02-04	24-05-05	27-11-06	--
4	Novetats	MN	16-03-06	21-12-06	21-12-06	21-12-06	--
5	PMF	SR	08-02-06	15-03-06	21-07-06	--	--
6	Intranet	MN	18-05-04				

4. Sumari del web *recercat.net*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal <i>www.recercat.net</i>	MT	16-10-05	15-09-06		
1	Què és?	RdV	16-10-05	21-12-05		
2	Estadístiques	RdV	16-10-05	30-09-05		
3	Novetats	MT	23-06-06	27-10-06		
4	Llista per comunitats i col·leccions	RdV	16-10-05	30-09-05		
5	Llista per títol	RdV	16-10-05	30-09-05		
6	Llista per autor	RdV	16-10-05	30-09-05		
7	Llista per data	RdV	16-10-05	30-09-05		
8	Rebre novetats	RdV	16-10-05	30-09-05		
9	El meu dipòsit	RdV	16-10-05	30-09-05		
10	Editar perfil	RdV	16-10-05	30-09-05		
11	Ajuda	RdV	16-10-05			16-10-05
12	Avis legal	MT	16-10-05	25-05-06		

5. Sumari del web *raco.cat*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal <i>www.raco.cat</i>	NT	27-04-06	27-04-06	27-04-06	27-04-06
1	Què és?	NT	27-04-06	27-04-06	27-04-06	27-04-06
2	Novetats	NT	27-04-06	21-12-06	21-12-06	21-12-06
3	Institucions participants	NT	27-04-06	20-12-06	20-12-06	20-12-06
4	Estadístiques	--	--	--		
5	Avis legal	NT	27-04-06	27-04-06	27-04-06	27-04-06

Annex XIII

Les portades del web

La portada del web del CESCA recull les novetats més destacades de cada mes que s'han produït en qualsevol de les seves tres àrees d'activitat (Sistemes, Comunicacions i Promoció), proporciona un accés directe a l'últim número publicat del *Teraflop* i destaca algunes de les entrades previstes a l'agenda, així com alguns enllaços d'interès.

Aquest annex recull les portades publicades al llarg de 2006.

En total, s'ha actualitzat la portada del web en 11 ocasions, un cop al mes excepte a l'agost.

2 de desembre

Tarifes per al 2006

La Comissió Permanent, de 2 de desembre, ha aprovat les noves tarifes per al 2006. També ha acordat reorganitzar els departaments del CESCA, que passen de 4 a 3, i els seus òrgans assessors, reduint-se de 13 a 7.

22 de novembre



Críteris d'accessibilitat

Han quedat actualitzats els webs del CESCA i del CATNIX per adaptar-los a la normativa segons la qual els webs d'entitats públiques han d'ésser accessibles per a tothom. Aprofitant les actualitzacions, s'ha creat un nou disseny.

12 de desembre



Ampliacions i noves connexions

L'IRO i el BSC-CNS han ampliat la seva connexió a l'Anella a 4 Mbps i 2 Gbps, respectivament. El CELLS i la FUNDEMI es connecten des del desembre a 10 Mbps i la FUB ho fa a 4 Mbps. Des del 18 de novembre, la UdL incorpora el servei VIA. Iberbanda es connecta al CATNIX des del 23 de novembre a 100 Mbps.

1 de desembre

Novetats sobre el TDX



Una tesi de la Universitat de València sobre el premi Nobel de Literatura, Harold Pinter, es troba al TDX, que ja compta amb 3.000 tesis doctorals. A més, la Universidad de Murcia ha introduït la seva primera tesi.

9 de desembre

1.000 documents a



El Dipòsit de la Recerca de Catalunya, RECERCAT, ja compta amb el document número 1.000, que ha estat incorporat per l'Institut de Ciències Polítiques i Socials de la UAB. Actualment hi ha 5 universitats que afegeixen documents a RECERCAT.

23 de novembre

L'efecte Bolonya als sistemes d'informació



La URL ha acollit la TSIUC05, on s'ha parlat sobre els efectes que la consecució de l'Espai Europeu d'Ensenyament Superior tindrà en els sistemes informàtics de les universitats. També va haver-hi un debat sobre l'estat d'aquest procés d'adequació en el sistema universitari català.

Català | Castellano | English

Número 85



S'inaugura el Barcelona Supercomputing Center

Números anteriors

Novetats

02-12	Tarifes per al 2006
22-11	Primera tesis UM
01-12	3.000 tesis al TDX
09-12	1.000 docs. al RECERCAT
05-10	Eduroam a l'Anella

Més novetats

Agenda

10-02	Comissió Tècnica i Assessora
24-02	Comissió Permanent
01-03	CTAC
02-03	CCP4-MAX INF workshop
06-04	Comissió Tècnica i Assessora

Més activitats

Enllaços d'interès

CATNIX
TDX
RECERCAT
Iberbanda
Universidad de Murcia

Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Supercomputació | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadales]

Última actualització: EM, 27-01-06

6 de febrer

5 anys de TDX



El servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) va iniciar-se fa cinc anys i avui dia disposa de 3.100 tesis i ha rebut més de 2 milions de consultes l'any 2005, sent un 30% de països llatinoamericans. A més de nou universitats del Consorci també s'hi han anat incorporant gradualment universitats de la resta de l'Estat: la de les Illes Balears, la de València, la Jaume I, la de Cantàbria i la de Múrcia. A més, des del 30 de gener, el TDX està inclòs al Directory of Open Access Repositories (DOAR). Aquest directori mostra els dipòsits de recerca en accés obert disponibles a tot el món.

13 de febrer

Convocatòria d'hores DGR



Oberta la convocatòria d'hores computacionals (HC) addicionals a càrrec de la Direcció General de Recerca (DGR). La convocatòria està adreçada a tots els grups de recerca que tinguin un mínim de 7.500 HC concedides per la seva pròpia institució. Els interessats han de sol·licitar-lo abans del 13 de març.

17 de febrer

Accés a la GIC



Gràcies a un ajut del MEC per a l'accés a les Grans Instal·lacions Científiques, els nostres recursos de supercomputació estan disponibles a investigadors externs al Consorci. Els interessats els han de sol·licitar abans del 30 de març.

7 de febrer

Més funcionalitat a l'SCF



El Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) ha ampliat les seves funcionalitats amb l'adquisició del programari Sybyl de Tripos, gràcies a un ajut del MEC per a la millora de les GIC. Tripos aporta noves eines per al disseny de fàrmacs.

2 de gener

Noves connexions i ampliacions



Des del 7 de febrer, el campus de la URV a Tortosa disposa d'un nou accés Ethernet a 34 Mbps mentre que la URV gaudeix d'un segon port Giganet a 40 Mbps per enllaçar directament amb el seu campus de Tortosa. L'ASPB amplia la seva connexió a l'Anella a 20 Mbps i el GIRO i la Unitat de Remugants, ambdós de IRTA, es connecten a l'Anella a 4 Mbps cadascun des del 2 i el 12 de gener, respectivament. Per altra banda, l'iberbanda amplia la seva connexió al CATNIX, des del 18 de gener, a 8 Mbps.

16 de febrer

El CTTC i la UAB nous participants



El desplegament d'Eduroam a Catalunya continua estenent-se. El Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya (CTTC) és el primer centre de recerca de Catalunya que ofereix aquest servei. D'altra banda, la UAB ha modificat la seva xarxa sense fils per tal que també s'hi pugui accedir mitjançant l'autenticació d'Eduroam.

21 de febrer

Convocatòria de ponències



S'obre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la desena Trobada de l'Anella Científica (TAC). La TAC se celebrarà la primera quinzena de juny. Les propostes de ponències poden enviar-se a tac@cesca.es fins el 28 d'abril.

9 de desembre

1.000 documents a RECERCAT



El Dipòsit de la Recerca de Catalunya, RECERCAT, ja compta amb el document número 1.000, que ha estat incorporat per l'Institut de Ciències Polítiques i Socials de la UAB. Actualment hi ha 5 universitats que afegeixen documents a RECERCAT.

Català | Castellano | English

Número 85



S'inaugura el Barcelona Supercomputing Center
Números anteriors

Novetats

- 02-12 Tarifes per al 2006
- 18-01 TDX durant 2005
- 02-12 Reorganització departaments
- 22-11 U. de Múrcia, al TDX
- 05-10 Eduroam a l'Anella

Més novetats

Agenda

- 02-03 CCP4-MAX INF workshop
- 08-03 Conferència Wikis
- 17-05 FesInternet
- 29-05 IGC
- 06-06 Introduction to Gaussian

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- MEC
- Tripos
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Supercomputació | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadales]

Última actualització: SS, 27-02-06

7 de març

Inauguració de la nova e-infraestructura



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

6 de febrer

5 anys de TDX



El servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) va iniciar-se fa cinc anys i avui dia disposa de 3.100 tesis i ha rebut més de 2 milions de consultes l'any 2005, sent un 30% de països llatinoamericans. A més de nou universitats del Consorci també s'hi han anat incorporant gradualment universitats de la resta de l'Estat: la de les Illes Balears, la de València, la Jaume I, la de Cantàbria i la de Múrcia. A més, des del 30 de gener, el TDX està inclòs al Directory of Open Access Repositories (DOAR). Aquest directori mostra els dipòsits de recerca en accés obert disponibles a tot el món.

13 de febrer

Convocatòria d'hores DGR



Oberta la convocatòria d'hores computacionals (HC) addicionals a càrrec de la Direcció General de Recerca (DGR). La convocatòria està adreçada a tots els grups de recerca que tinguin un mínim de 7.500 HC concedides per la seva pròpia institució. Els interessats han de sol·licitar-lo abans del 13 de març.

17 de febrer

Accés a la GIC



Gràcies a un ajut del MEC per a l'accés a les Grans Instal·lacions Científiques, els nostres recursos de supercomputació estan disponibles a investigadors externs al Consorci. Els interessats els han de sol·licitar abans del 30 de març.

3 de març

La Fundació Hospital Asil de Granollers, a l'Anella



La Fundació Hospital Asil de Granollers (FHAG) s'ha connectat a l'Anella Científica amb un punt d'accés Giganet de 10 Mbps. L'FHAG integra l'Hospital General de Granollers i el Centre Geriàtric Adolfo Montañá. Ofereix serveis sanitaris i socio-sanitaris que contribueixen de forma integral i personalitzada a la millora de la salut pública alhora que també centra la seva activitat en la docència de pregrau associada a la UB.

16 de febrer

El CTTC i la UAB nous participants



El desplegament d'Eduroam a Catalunya continua estenent-se. El Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya (CTTC) és el primer centre de recerca de Catalunya que ofereix aquest servei. D'altra banda, la UAB ha modificat la seva xarxa sense fils per tal que també s'hi pugui accedir mitjançant l'autenticació d'Eduroam.

21 de febrer

Convocatòria de ponències



S'obre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la desena Trobada de l'Anella Científica (TAC). La TAC se celebrarà la primera quinzena de juny. Les propostes de ponències poden enviar-se a tac@cesca.es fins el 28 d'abril.

7 de febrer

Més funcionalitat a l'SCF



El Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) ha ampliat les seves funcionalitats amb l'adquisició del programari Sybyl de Tripos, gràcies a un ajut del MEC per a la millora de les GIC. Tripos aporta noves eines per al disseny de fàrmacs.

Català | Castellano | English

Número 85



S'inaugura el Barcelona Supercomputing Center

Números anteriors

Novetats

- 02-12 Tarifes per al 2006
- 16-01 TDX durant 2005
- 02-12 Reorganització departaments
- 22-11 U. de Murcia, al TDX
- 06-10 Eduroam a l'Anella

Més novetats

Agenda

- 02-03 CCP4-MAX INF workshop
- 08-03 Conferència Wikis
- 17-05 FesInternet
- 29-05 IOC
- 06-06 Introduction to Gaussian

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
 - TDX
 - RECERCAT
 - MEC
 - Tripos
- Més enllaços

21 de març

Memòria d'activitats



Està disponible la Memòria d'activitats de 2005 a text complet en format PDF (12 MB)

22 de març

Adjudicació d'hores DGR



La Direcció General de Recerca (DGR) ha resolt la concessió de les hores computacionals que subvenciona. Se n'han concedit 410.000 a 17 grups de recerca.

29 de març

Participació a FesInternet



Visiteu el CESCA i conegueu els nostres serveis amb les visites guiades organitzades del 2 al 5 de maig dins FesInternet. Per assistir-hi, cal fer una preinscripció.

6 d'abril

Eduroam continua creixent



La Universitat de Vic i l'XTEC s'incorporen a aquest servei que permet que investigadors i estudiants d'arreu d'Europa disposin de connectivitat, majoritàriament sense fils, quan són a les institucions participants.

21 de febrer

Convocatòria de ponències



Sobre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la desena Trobada de l'Anella Científica, que se celebrarà el 14 de juny a la Universitat de Barcelona amb el títol "Nous horitzons en les comunicacions". Les propostes de ponències poden enviar-se a tac@cesca.es fins el 28 d'abril.

30 de març

Revistes Catalanes amb Accés Obert



S'ha posat en marxa RACO, un dipòsit que permet la difusió de revistes científiques, culturals i erudites catalanes amb accés obert. Actualment compta amb 90 publicacions, a les quals facilita l'edició, la difusió i la preservació. Per tal d'ajudar a la digitalització de revistes retrospectives s'ha fet pública una convocatòria d'ajuts que finalitza el 19 de maig.

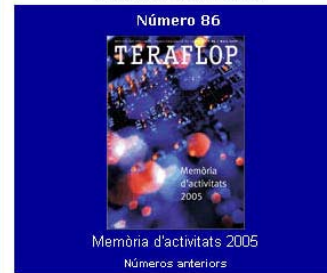
16 de març

Ampliacions a l'Anella



El Campus de Sabadell de la UAB amplia la seva connexió de 34 Mbps a 100 Mbps, i tres punts d'accés de la URL (FUNDEMI, Escola de Turisme Sant Ignasi i Fundació Blanquerna) dupliquen de 10 Mbps a 20 Mbps.

Català | Castellano | English



Novetats

- 07-03 Inauguració
- 03-03 FHAG, a l'Anella
- 07-02 SCF
- 06-02 5 anys de TDX
- 02-12 Tarifes per al 2006

Més novetats

Agenda

- 31-03 Desplegando WLAN
- 02-05 FesInternet
- 29-05 IGC
- 06-06 Introduction to Gaussian
- 14-06 TAC

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- RACO
- Gaussian
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadales]

Última actualització: TV, 07-04-06

8 de maig

Oferta de treball de tècnic/a de comunicacions



El CESCA busca un enginyer tècnic de telecomunicacions o d'informàtica, preferentment recent graduat, per incorporar-se al Departament de Comunicacions. Els interessats han d'enviar el seu currículum abans del **31 de maig**.

10 de maig

El CIEMAT a l'Anella



El Centro de Investigaciones Energéticas Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT) s'ha connectat a l'Anella amb dos punts d'accés d'1 Gbps i 10 Mbps. El primer dels punts donarà connectivitat a l'Agència Legal Europea pel projecte ITER que depèn del CIEMAT i el segon, a la seu administrativa que el CIEMAT té a Barcelona.

5 de maig

Programa disponible



La desena Trobada de l'Anella Científica se celebrarà el 14 de juny a la Universitat de Barcelona amb el lema "Nous horitzons en les comunicacions". Per assistir-hi ja podeu realitzar la vostra inscripció.

24 d'abril

Primera tesi de la Universidade da Coruña al TDX



La Universidade da Coruña (UDC) ha introduït la seva primera tesi al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). La tesi porta per títol *Partículas, Volúmenes Finitos y Mallas no Estructuradas: Simulación Numérica de Problemas de Dinámica de Fluidos*, de Luis Cueto-Felgueroso, i ha estat dirigida pel Dr. Ignasi Colominas. Amb la UDC ja són 15 les universitats que participen al TDX.

18 d'abril

Concessió d'hores MEC



Gràcies al patrocini del Ministerio de Educación y Ciencia per facilitar l'accés a les GIC s'han concedit 24.000 hores computacionals (HC) a 6 grups de recerca.

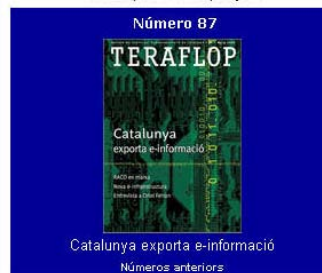
27 de març

Revistes Catalanes amb Accés Obert



S'ha posat en marxa RACO, un dipòsit que permet la difusió de revistes científiques, culturals i erudites catalanes amb accés obert. Actualment compta amb 90 publicacions, a les quals facilita l'edició, la difusió i la preservació. Per tal d'ajudar a la digitalització de revistes retrospectives s'ha fet pública una convocatòria d'ajuts que finalitza el 19 de maig.

Català | Castellano | English



Novetats

05-05	FesInternet
26-04	Segon port d'1 Gbps de la UAB
28-03	600 tesis de la UB
07-03	Disponible el servei RSS
02-12	Tarifes per al 2006

Més novetats

Agenda

29-05	IGC
06-06	Introduction to Gaussian
14-06	TAC
27-06	ISC 2006

Més activitats

Enllaços d'interès

CATNIX
TDX
RECERCAT
RACO
Gaussian
Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avís legal | Nadales]

Última actualització: SS, 24-05-06

10 de maig

El Dept. de Salut s'incorpora al CESCA



El Consell de Govern del CESCA ha acceptat satisfactòriament la proposta del Dept. de Salut per a la seva incorporació a aquest òrgan de govern, en el qual a partir d'ara hi haurà representats tres departaments de la Generalitat: Universitats, Recerca i Societat de la Informació, Treball i Indústria, i Salut. Aquesta incorporació permet aprofundir en l'ús de les e-infraestructures de recerca que el CESCA gestiona, especialment l'Anella Científica.

25 de maig

El PRBB, a l'Anella



El Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona (PRBB), inaugurat el 15 de maig, s'ha connectat a l'Anella amb un punt d'accés Gigaset de 100 Mbps. El PRBB és una gran infraestructura europea de recerca en el camp de la biomedicina que té com a objectiu l'estudi de la base genètica i molecular de la vida, i la solució dels problemes de salut emergents.

16 de maig

300 tesis de la UV, al TDX



La Universitat de València ha introduït la seva tesi número 300 al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). Es tracta de la tesi de María Jesús Arcusa amb el títol *Estudio de toxicidad aguda S(+)-Ketamina y RS-Ketamina administrada por vía subaracnoidea en conejos. Comparación con lidocaina*. El director de la tesi ha estat Juan Gallego, professor del departament de Cirurgia de la UV.

5 de maig

Programa disponible



La desena Trobada de l'Anella Científica s'ha celebrat a la Universitat de Barcelona amb el lema "Nous horitzons en les comunicacions".

24 de maig

Modificacions a l'Anella



La Fundació Pere Tarrés (FPT) de la URL ha duplicat la seva velocitat de connexió a l'Anella Científica passant de 10 a 20 Mbps. D'altra banda, l'Institut de Govern i Polítiques Públiques (IGOP) de la UAB s'ha connectat a l'Anella amb una línia ADSL a 4 Mbps i l'Escola Universitària Politècnica de Mataró (EUPMT) de la UPC ha canviat el radioenllaç que feia servir per connectar-se a l'Anella per la fibra òptica.

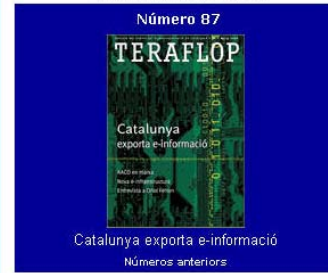
11 de maig

Presentació RACO



S'ha presentat el dipòsit Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) a la Sala Llevant de la Biblioteca de Catalunya amb la participació dels representants de la Generalitat i de les institucions coordinadores. RACO és el tercer dipòsit col·laboratiu que el CESCA i el CBUC posen al servei del sistema universitari i que contribueix a difondre la producció científica catalana, atorga més visibilitat, tant als autors com a les revistes que inclou, i ajuda a que aquestes últimes es puguin preservar en excel·lents condicions.

Català | Castellano | English



Novetats

30-05	La UOC, a RECERCAT
25-05	Reestructuració de les cues de <i>batch</i>
15-05	ScaLAPACK i FFTW, a l'HP CP4000
10-05	Ei Ciernat, a l'Anella
02-12	Tarifes per al 2006

Més novetats

Agenda

01-06	Grups de treball de RedIRIS
12-06	Conferència PADICAT
14-06	TAC
16-06	OWASP
06-07	Presentació WebAnalysis

Més activitats

Enllaços d'interès

CATNIX
TDX
RECERCAT
RACO
PRBB

Més enllaços

7 de juny

Concessió d'ajuts per a la digitalització de revistes



D'acord amb la convocatòria d'ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes a incorporar en el servidor de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) s'han concedit 20.260 € per digitalitzar 428 exemplars de 15 revistes, amb un total de 77.119 pàgines.

4 de juliol

Ampliat l'Altix a 128 processadors



L'SGI Altix 3700 ha augmentat la seva capacitat en 32 processadors Itanium2 a 1,8 GHz i 96 GB més de memòria passant a tenir 128 processadors, 384 GB de memòria i 6,1 TB en disc, amb un R_{punta} de 819,20 Gflops i un R_{max} estimat de 720,60 Gflops i situant-se com el sistema Altix amb memòria comú més potent de l'Estat per a la universitat i la recerca.

27 de juny

3.500 tesis al TDX



El servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) ja conté 3.500 tesis a text complet. La tesi titulada *Essays on bayesian and classical econometrics with small samples* escrita per Marek Jarocinski i dirigida per Albert Marcat Torrens del Departament d'Economia i Empresa de la UPF ha estat la que ha aconseguit aquesta fita.

14 de juny

Nous horitzons en les comunicacions



La 10a Trobada de l'Anella Científica (TAC) s'ha celebrat a la Universitat de Barcelona i ha estat dedicada a parlar sobre nous horitzons en les comunicacions i la integració de noves funcionalitats a la xarxa.

7 de juliol

Crida de ponències



Sobre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC). La Trobada se celebrarà el 9 de novembre a la Universitat de Lleida (UdL) i tractarà sobre "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia". El termini de presentació de ponències finalitza el 15 de setembre. Podeu enviar les vostres propostes a promocio@cesca.es.

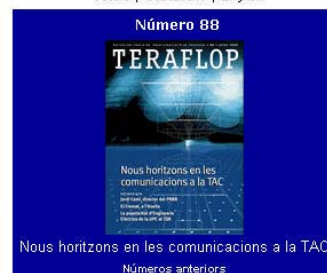
7 de juliol

Jaguar i GAUSS disponibles



S'ha instal·lat Jaguar 6.5 a l'HP CP4000 i a l'SGI Altix, i GAUSS 7.0 a l'HP CP4000. Jaguar permet fer càlculs *ab-initio* amb tècniques de correlació local, mentre que GAUSS és usat per fer càlculs ràpids i anàlisis complexos de milions de dades estadístiques.

Català | Castellano | English



Nous horitzons en les comunicacions a la TAC
Números anteriors

Novetats

- 04-07 Actualització de l'LSF
- 30-06 La UdG, a RECERCAT
- 19-06 100 revistes a RACO
- 15-06 Actualització de GROMACS
- 25-05 El PRBB, a l'Anella

Més novetats

Agenda

- 06-07 Netsuus
- 18-09 MOE workshop
- 07-11 10 anys de l'SDF
- 09-11 TSIUC'06
- 13-11 Setmana de la Ciència

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- RACO
- SGI
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avís legal | Nadales]

Última actualització: TV, 07-07-06

2 d'agost

Ofertes de treball de tècnica de sistemes i de comunicacions



El CESCA busca un enginyer tècnic mitjà en Informàtica per incorporar-se al Departament de Sistemes i un enginyer tècnic en Telecomunicacions o Informàtica per incorporar-se al Departament de Comunicacions. Els interessats/des han d'enviar el seu currículum abans del dia 22 de setembre a treball@cesca.es.

7 de juliol

Crida de ponències



S'obre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC). La Trobada se celebrarà el 9 de novembre a la Universitat de Lleida (UdL) i tractarà sobre "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia". El termini de presentació de ponències finalitza el 15 de setembre. Podeu enviar les vostres propostes a promocio@cesca.es.

4 de juliol

Ampliat l'Altix a 128 processadors



L'SGI Altix 3700 ha augmentat la seva capacitat en 32 processadors Itanium2 a 1,6 GHz i 96 GB més de memòria passant a tenir 128 processadors, 384 GB de memòria i 6,1 TB en disc, amb un R_{punta} de 819,20 Gflop/s i un R_{max} estimat de 720,60 Gflop/s i situant-se com el sistema Altix amb memòria comú més potent de l'Estat per a la universitat i la recerca.

4 de setembre

Oberta la convocatòria de projectes per al 2007

Els grups de recerca rebran properament, dels seus vicerectorats o del coordinador institucional del CSIC a Catalunya, la convocatòria de projectes acadèmics per a l'any vinent. El total d'hores computacionals disponible és de 1.563.000. Els projectes no renovats abans del 15 de desembre es tancaran el 31 de desembre.

27 de juliol

Crida de ponències per a la jornada, 10 anys de l'SDF



El 7 de novembre es compleixen 10 anys de la creació del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), un servei pioner i innovador a l'Estat que ha facilitat l'avenç en la investigació farmacològica tant al món acadèmic com a l'industrial. Per celebrar-ho, s'organitza una jornada amb la finalitat de compartir coneixements i experiències, així com debatre les necessitats de futur tant dels laboratoris farmacèutics com dels grups acadèmics que investiguen en nous fàrmacs. Podeu enviar les vostres propostes de ponència a promocio@cesca.es abans del 29 de setembre.

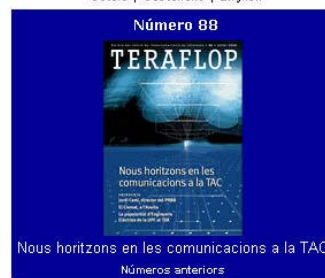
20 de juliol

La Fundació Barcelona Media UPF, a l'Anella



La Fundació Barcelona Media Universitat Pompeu Fabra s'ha connectat a l'Anella Científica amb un punt d'accés gigaset de 10 Mbps. Aquesta institució té com a missió millorar la competitivitat de les empreses en l'àmbit de la comunicació, atenent tant a la tecnologia com als continguts.

Català | Castellano | English



Nous horitzons en les comunicacions a la TAC
Números anteriors

Novetats

- 25-07 700 tesis de la UB, al TDX
- 17-07 Regularització d'hores de la DGR
- 13-07 Noves revistes a RACO
- 07-07 Instal·lació de Jaguar
- 02-12 Tarifes per al 2006

Més novetats

Agenda

- 18-09 MOE workshop
- 07-11 10 anys de l'SDF
- 09-11 TSIUC'06
- 13-11 Setmana de la Ciència

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- RACO
- FBM
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadalés]

Última actualització: SS, 04-09-06

6 d'octubre

Jornada "10 anys de l'SDF"



Al novembre es compleixen 10 anys de la creació del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), un servei pioner i innovador a l'Estat que ha facilitat l'avenç en la investigació en nous fàrmacs tant al món acadèmic com a l'industrial. Per celebrar-ho, el dia 7 de novembre tindrà lloc una jornada per compartir coneixements i experiències, així com debatre les necessitats de futur, adreçada als usuaris del servei.

6 d'octubre

Trobada sobre l'EEES



La TSIUC se celebrarà el 9 de novembre a la Universitat de Lleida i tractarà "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia". Podeu fer les vostres inscripcions fins el 3 de novembre.

4 de setembre

Oberta la convocatòria de projectes per al 2007

Els grups de recerca rebran properament, dels seus vicerektorats o del coordinador institucional del CSIC a Catalunya, la convocatòria de projectes acadèmics per a l'any vinent. El total d'hores computacionals disponible és d'1.563.000. Els projectes no renovats abans del 15 de desembre es tancaran el 31 de desembre.

11 de setembre

PADICAT, la memòria d'internet



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

15 de setembre

El TDX en el curs acadèmic 2005-06



Coincint amb l'inici del curs acadèmic, s'han emès els primers certificats de reconeixement a les tres tesis més consultades de cada universitat que participa al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

14 de setembre

Ampliació de l'EVA



El subsistema de discos Enterprise Virtual Array V.2 (EVA) ha augmentat la seva capacitat amb 30 discos de 146 GB i una nova safata de discos. Així, la capacitat d'emmagatzematge ha passat de 10,15 a 14,47 TB en brut.

Català | Castellano | English

Número 89



PADICAT comença a preservar el patrimoni digital català

Números anteriors

Novetats

02-11 Tarifes per al 2007

13-10 Regularització d'hores de la DGR

10-10 Oferta de coordinador de projectes

29-09 Noves revistes a RACO

26-09 Documents a RECERCAT

Més novetats

Agenda

17-10 Jornades de signatura electrònica

18-10 Schrödinger Seminar

07-11 10 anys de l'SDF

09-11 TSIUC'06

13-11 Setmana de la Ciència

Més activitats

Enllaços d'interès

CATNIX

TDX

RECERCAT

RACO

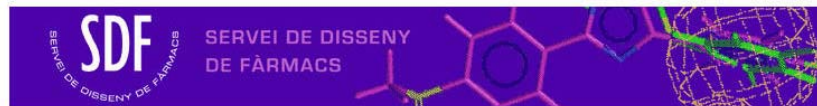
PADICAT

Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadales]

Última actualització: SS, 02-10-06



7 de novembre

Jornada "10 anys de l'SDF"



S'han celebrat els 10 anys de la creació del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), un servei pioner i innovador a l'Estat que ha facilitat l'avenç en la investigació en nous fàrmacs tant al món acadèmic com a l'industrial. La jornada ha estat destinada a compartir coneixements i experiències, així com debatre les necessitats de futur del servei.

17 d'octubre

Digitalització de *Lauro*



Lauro ha estat la primera publicació que s'ha incorporat a RACO fruit dels ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes que es van engegar el passat mes de març i que comptaven amb 20.000 € patrocinats per la Secretaria de Telecomunicacions del Departament de Presidència de la Generalitat de Catalunya. A més d'aquesta revista, 14 publicacions més que van rebre l'ajut estaran també digitalitzades i disponibles a RACO a final d'any.

27 d'octubre

Presentació de PADICAT



S'ha presentat el dipòsit Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) a la Sala Llevant de la Biblioteca de Catalunya amb la participació dels representants de la Generalitat i de les institucions coordinadores. PADICAT és un dipòsit destinat a recollir i preservar tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital.

9 de novembre

L'EEES a la TSIUC'06



S'ha celebrat la setena edició de la TSIUC a la Universitat de Lleida. Aquest any ha tractat sobre "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia" i ha comptat amb un debat sobre el paper dels serveis informàtics i les biblioteques en l'EEES.

31 d'octubre

Ampliació dels clústers de càlcul i d'e-informació



L'HPC CP4000 s'ha ampliat amb 17 nodes més, arribant a un total de 33 nodes i 66 processadors (132 nuclis) AMD64 i 528 GB de memòria. Pel que fa al clúster d'e-informació, ha augmentat la seva capacitat en 16 nodes DL360 G4p amb 148 GB de memòria cadascun i 1.236 GB en discos Ultra320.

10 de novembre

Ampliació del grup electrogen



S'ha ampliat el grup electrogen del CESCA de 165 kVA a 450 kVA. Aquest equip s'encarrega de donar corrent al maquinari del Centre en cas de fallada de la xarxa elèctrica per tal de gaudir de més fiabilitat i autonomia.

Català | Castellano | English

Número 89



PADICAT comença a preservar el patrimoni digital català

Números anteriors

Novetats

- 02-11 Tarifes per al 2007
- 02-11 200 tesis de la UdG al TDX
- 27-10 El Centre UNESCO amplia a 4 Mbps
- 13-10 Regularització d'hores de la DGR
- 09-10 Nova col·lecció de la UAB a RECERCAT

Més novetats

Agenda

- 13-11 Setmana de la Ciència
- 13-11 Jornades Tècniques RedIRIS
- 29-11 Jornades Univers Lliure

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- RACO
- PADICAT
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avis legal | Nadalés]

Última actualització: SS, 10-11-06

11 de desembre

Tesi premiada al TDX



El servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) conté la tesi *El daño ecológico puro. La responsabilidad civil por el deterioro del medio ambiente*, que ha obtingut el primer guardó dels V Premios para tesis doctorales y trabajos de investigación sobre protección civil atorgats per la Dirección General de Protección Civil y Emergencias del Ministerio del Interior.

7 de novembre

Jornada "10 anys de l'SDF"



S'han celebrat els 10 anys de la creació del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), un servei pioner i innovador a l'Estat que ha facilitat l'avenç en la investigació en nous fàrmacs tant al món acadèmic com a l'industrial. La jornada ha estat destinada a compartir coneixements i experiències, així com debatre les necessitats de futur del servei.

9 de novembre

L'EEES a la TSIUC'06



S'ha celebrat la setena edició de la TSIUC a la Universitat de Lleida. Aquest any ha tractat sobre "L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia" i ha comptat amb un debat sobre el paper dels serveis informàtics i les biblioteques en l'EEES.

27 de novembre

El TDR disponible en gallec



El servidor de Tesis Doctorales en Red (TDR) ha incorporat el gallec gràcies a la col·laboració de la Universidade da Coruña. Fins ara, el TDR estava disponible en català, castellà i anglès.

5 de desembre

El Campus de Bellisens connectat per fibra a l'Anella



El Campus de Bellisens de la Universitat Rovira i Virgili, a Reus, s'ha connectat a l'Anella Científica a una velocitat de 100 Mbps a través de fibra òptica. Aquest és un dels punts d'accés que estava previst proveir amb fibra arrel de la pròrroga del contracte de prestació del servei de l'Anella amb Al-Pi Telecomunicacions fins al 2008.

10 de novembre

Ampliació del grup electrogen



S'ha ampliat el grup electrogen del CESCA de 165 kVA a 400 kVA. Aquest equip s'encarrega de donar corrent al maquinari del Centre en cas de fallada de la xarxa elèctrica per tal de gaudir de més fiabilitat i autonomia.

Català | Castellano | English

Número 90



Deu anys de col·laboració universitat-empresa en el disseny de fàrmacs

Números anteriors



Novetats

- 18-12 El BSC-CNS i la UPC, a Eduroam
- 01-12 Contribució a l'OJS
- 18-11 100 tesis de la UdL al TDX
- 09-11 1.400 tesis de la UAB al TDX
- 02-11 Tarifes per al 2007

Més novetats

Agenda

- 12-03 Jornades de portes obertes
- 28-03 Scienomics Seminar

Més activitats

Enllaços d'interès

- CATNIX
- TDX
- RECERCAT
- RACO
- PADICAT
- Més enllaços

Centre de Supercomputació de Catalunya

[Qui som? | Sistemes | Comunicacions | Promoció | On som? | Novetats | Agenda | Enllaços | Mapa web | Accessibilitat | Avís legal | Nadales]

Última actualització: SS, 19-12-06

Annex XIV

Les novetats del web

S'han publicat un total de 123 novetats al web del CESCA:

Gener

- 2 El Centre Tecnològic GIRO es connecta a l'Anella Científica
- 12 La unitat de Remugants de l'IRTA, a l'Anella
- 16 El TDX durant el 2005
- 18 Iberbanda amplia la seva connexió al CATNIX
- 19 L'ASPB amplia la seva connexió a 20 Mbps
- 24 Oferta de treball de tècnic/a en microinformàtica

Febrer

- 6 5 anys de TDX
- 7 Nou punt d'accés a l'Anella de la URV
Adquisició del programari Tripos
- 8 Noves versions de DL_POLY
- 13 Convocatòria d'hores de la DGR
- 14 Baixa de KPG Communications al CATNIX
- 17 El CTTC i la UAB ja disposen del servei Eduroam
Convocatòria d'ajudes del MEC per a l'accés telemàtic d'investigadors externs
- 20 Iberbanda amplia la seva connexió al CATNIX

Març

- 3 La Fundació Hospital Asil de Granollers, a l'Anella
- 5 Apagat l'HP V2500
- 7 Inauguració de la nova e-infraestructura de càlcul, d'informació i d'emmagatzematge
El servei RSS, disponible al web del CESCA
- 9 El Campus de Sabadell de la UAB amplia la seva connexió a 100 Mbps
- 13 La FundEmi i l'Escola de Turisme Sant Ignasi dupliquen la seva connexió a l'Anella
- 16 Tres punts d'accés de la URL amplien a 20 Mbps
- 17 L'XTEC s'incorpora a Eduroam
- 22 Concessió d'hores de la DGR
- 27 Es posa en marxa RACO
- 28 600 tesis de la UB al TDX
- 29 Participació a FesInternet
- 30 Convocatòria d'ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes

Abril

- 6 La UVic i l'XTEC ja disposen del servei Eduroam
- 18 Concessió d'hores del MEC per a l'accés al GIC
- 24 La Universidade da Coruña introdueix la primera tesi al TDX
- 26 Segon port d'accés de la UAB d'1 Gbps

Maig

- 4 El Ciemat s'incorpora a l'Anella Científica
- 8 Oferta de treball de tècnic/a de comunicacions
- 10 Nou punt d'accés del Ciemat a 10 Mbps
El Departament de Salut s'incorpora al CESCA
- 11 Presentació del dipòsit Revistes Catalanes amb Accés Obert
- 15 AMD ScaLAPACK i FFTW instal·lats a l'HP CP4000
- 16 L'IGOP de la UAB, a l'Anella
300 tesis de la UV al TDX
- 18 L'EUPMT de la UPC passa a fibra òptica
- 24 L'FPT de la URL amplia la seva connexió
- 25 Reestructuració de les cues de *batch*
El Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona, a l'Anella
- 30 Incorporació de la UOC i noves col·leccions a RECERCAT

Juny

- 1 Noves revistes a RACO
- 7 Concessió d'ajuts per a la digitalització de revistes
- 13 500 tesis de la UPC al TDX
- 14 Nous horitzons en les comunicacions a la TAC'06
- 15 Actualització de GROMACS
- 19 100 revistes a RACO
- 21 1.300 tesis de la UAB al TDX
- 22 Oferta de cooperació educativa
- 27 3.500 tesis al TDX
- 28 100 tesis de la UPF al TDX
- 29 Instal·lació de GAUSS 7.0 a l'HP CP4000
- 30 Incorporació de la UdG i noves col·leccions a RECERCAT

Juliol

- 4 Ampliat l'Altix a 128 processadors
Actualització de l'LSF
- 6 Instal·lació de Jaguar al CP4000 i l'Altix
- 7 Convocatòria de ponències per a la TSIUC'06
- 13 *LSC-Llengua, societat i comunicació* i *Beceroles*, a RACO
- 17 Regularització d'hores de la DGR
- 20 La Fundació Barcelona Media UPF es connecta a l'Anella
- 24 Nova versió d'ADF al CP4000 i l'Altix
- 25 700 tesis de la UB al TDX
- 26 GAMESS 2005 disponible
- 27 Convocatòria de ponències per a la jornada "10 anys del Servei de Disseny de Fàrmacs"
- 28 Oferta de treball de tècnic/a de sistemes (TS/AGI2)
- 29 NAMD 2.6b1 disponible
- 31 Catalyst 4.11 disponible

Agost

- 2 Oferta de treball de tècnic/a de comunicacions

Setembre

- 1 Noves versions de DL_POLY
- 4 Convocatòria de projectes de supercomputació per al 2007
- 11 PADICAT, la memòria d'internet
- 14 Ampliació de l'EVA
- 15 El TDX durant el curs acadèmic 2005-06
- 26 Nous documents i col·leccions a RECERCAT
- 28 Segon centre del Departament Nutrició Animal de l'IRTA, a l'Anella
- 29 Noves revistes a RACO
 - Nova versió de BEA JRockit® al CP4000 i l'Altix
 - Retransmissió en directe de televisió d'alta definició sobre IP

Octubre

- 2 Noves revistes a RACO
 - GSL-1.8 i HDF5-1.6.5 a l'Altix
- 9 Acord de col·laboració amb el CTC
 - Nova col·lecció de la UAB, a RECERCAT
- 10 FFTW 3.1.2 al CP4000 i a l'Altix
 - Oferta de treball de coordinador de projectes
 - Nova comanda de cerca per any de defensa de la tesi, al TDX
- 13 Regularització d'hores de la DGR
- 17 La revista *Lauro*, a RACO gràcies als ajuts de digitalització
- 19 Gaussian 03 Rev. D.02, disponible
- 23 Oferta de cooperació educativa
- 26 GADGET-2 a l'Altix
- 27 El Centre UNESCO amplia la seva connexió a 4 Mbps
 - Presentació del dipòsit Patrimoni Digital de Catalunya
- 31 Ampliació dels clústers de càlcul i e-informació
 - Nou rècord de consultes al TDX

Novembre

- 2 Tarifes per al 2007
 - 200 tesis de la UdG al TDX
- 7 10 anys de col·laboració universitat-empresa en el disseny de fàrmacs
- 9 L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia
 - 1.400 tesis de la UAB al TDX
- 10 Ampliació del grup electrogen
- 17 L'EUPMT i l'IQS amplien la seva connexió a l'Anella Científica
- 18 100 tesis de la UdL al TDX
- 21 La Biblioteca de l'Abadia de Montserrat, a l'Anella
- 24 La revista *Quaderns-e*, a RACO
- 27 El TDX disponible en gallec

Desembre

- 1 Contribució a l'OJS amb la traducció al català
 - Hores addicionals del MEC
- 4 La UPC, a Eduroam
- 5 El Campus de Bellisens connectat per fibra a l'Anella Científica

- 11 La millor tesi doctoral sobre protecció civil, al TDX
- 14 S'atura l'StorageTek
- 18 El BSC-CNS ja disposa del servei Eduroam
- 19 4.000 tesis doctorals al TDX
- 20 Oferta de treball de secretari/ària
Reduccions i Scientia gerundensis, a RACO
- 29 Padicat recull la informació de les eleccions
S'acaba la retrodigitalització de revistes a RACO per al 2006
Milliores a Recercat
Apagat l'N4000

Aquestes novetats estan descrites al web.

Annex XV

La formació

Aquest annex descriu les activitats de formació realitzades, classificades en tres categories: jornades i seminaris, Aula de Noves Tecnologies i conferències.

Durant el 2006 s'han organitzat 3 jornades i 6 seminaris:

1. CCP4-MAX INF Workshop on Phasing and Refinement.
2. Introduction to Gaussian: Theory and Practice.
3. TAC: Nous horitzons en les comunicacions.
4. The Open Web Application Security Project (OWASP).
5. MOE Training Session.
6. Gestió de grans volums de dades.
7. Schrödinger Seminar.
8. 10 anys del Servei de Disseny de Fàrmacs.
9. TSIUC: L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia.

A l'Aula de Noves Tecnologies s'ha impartit un únic curs:

1. Administració de sistemes SGI Altix sobre SuSE/SLES9.

Per acabar, s'han realitzat 29 conferències, quatre a l'hivern, sis a la primavera, deu a l'estiu i nou a la tardor. Del total de conferències, 12 han estat de caràcter intern, destinades a la formació del personal del Centre.

1. C. Frago i F. Monserrat, *Botnet Malware Analysis*, FIRST Technical Colloquium, Haarlerbergpark (Amsterdam).
2. C. Frago, *Securing Web Applications at the Network Layer*, WebSec'06: Hacking y Seguridad Web, Ciutat de Mèxic.
3. J. Aramberri, *Wikipedia: la col·laboració, una dimensió para los sitios web*, videoconferència d'ISOC-ES.
4. C. Frago, *Desplegando WLAN: Bueno, bonito y... seguro?*, IV Foro de seguridad RedIRIS, Sant Sebastià (Guipúscoa).
5. C. Frago, *Seguretat a l'Anella Científica*, Seguretat i Sistemes d'Informació, Sabadell (Barcelona).
6. C. Frago, *Seguridad en la Red*, 3er Curso de Seguridad, Vigo (Pontevedra).
7. J. Prats, *Autenticació mitjançant certificats digitals*, CESCA.
8. C. Lluca, *El projecte PADICAT (Patrimoni Digital de Catalunya): arxivant el web català*, CESCA.
9. H. Pujol, *La protecció de dades personals al CESCA*, CESCA.

10. M. Huguet, *e-infraestructures per a la recerca a l'EEES*, Grupo de Trabajo CRUE-TIC, Tarragona.
11. C. Frago, *Política de seguretat del CESCA*, CESCA.
12. M.I. Gandia, *The Scientific Ring: the Catalan RREN Network Infrastructure*, 21st TERENA TF-NGN Meeting, Ljubljana (Eslovènia).
13. J. Clotet, *Presentació del projecte Netsuus*, CESCA.
14. R. de la Vega, *Dipòsits col·lectius d'e-informació*, V Jornades de Programari Lliure, Barcelona.
15. R. Castells, *Consells per al disseny de diapositives*, CESCA.
16. T. Via, *Consells per a l'elaboració de documents*, CESCA.
17. G. Forn, *Virtualització de servidors*, CESCA.
18. M. Huguet, *15 anys de supercomputació al servei de la recerca*, Jornadas Tecnológicas SGI, Madrid.
19. M. Huguet, *15 anys de supercomputació al servei de la recerca*, Jornadas Tecnológicas SGI, Barcelona.
20. J. Blasco, *Clúster d'e-informació*, CESCA.
21. C. Frago, *Seguretat física*, CESCA.
22. J. Prats, *Formes d'atac a les aplicacions web*, CESCA.
23. M.I. Gandia, *El CESCA, 15 anys al servei de la universitat i la recerca*, E-week, Vic (Barcelona).
24. R. de la Vega, *Dipòsits col·lectius d'e-informació*, Jornadas Técnicas RedIRIS, Granada.
25. I. Bàrcena, *Servei de Disseny de Fàrmacs*, CESCA.
26. C. Frago, *Seguretat a l'entorn de treball*, CESCA.
27. H. Pujol, *Les institucions de l'Anella Científica a Eduroam*, CESCA.
28. R. Ros i R. de la Vega, *Dipòsits d'e-informació a Catalunya*, Repositorios institucionales: una vía hacia el acceso, la visibilidad y la preservación de la producción científica, Saragossa.
29. M.I. Gandia, *Veu sobre IP*, CESCA.

Aquestes activitats estan descrites al web.