



Memòria d'activitats de 2004



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

L'any 2004 el Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya ha continuat centrant el seu treball en els tres eixos d'actuació consolidats al llarg de 13 anys de servei a la Universitat i a la Recerca de Catalunya:

- **La supercomputació**, que inclou des del fundacional servei de càlcul d'altres prestacions als d'emmagatzematge de dades, cerca de farmacòfors, i accés a gestors d'informació per Internet com ara el servidor Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).
- **Les comunicacions**, que gestionen l'Anella Científica i els seus dotze serveis addicionals (seguretat, certificació digital, veu sobre IP...) i el Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX), a més de l'allotjament i l'hostatge de servidors d'altres institucions i del nus de RedIRIS de Catalunya.
- **La promoció**, que proporciona formació en aquestes noves tecnologies i en fa difusió a través de la revista del Centre *Teraflop* i d'altres mitjans de comunicació.

Aquesta memòria descriu les activitats desenvolupades en cadascuna d'aquestes tres àrees, i presenta els òrgans de govern i assessors que han fet possible la seva realització.

Sumari

1. Les activitats de 2004.....	3
2. Els òrgans de govern i els assessors	8
2.1. Els òrgans de govern	8
2.2. Els òrgans assessors	10
2.3. Les comissions i grups de treball	11
3. La supercomputació	12
3.1. El maquinari	13
3.2. El programari	18
3.3. Els serveis de càlcul	19
3.4. Tesis Doctorals en Xarxa	25
3.5. Altres serveis	29
4. Les comunicacions.....	30
4.1. L'Anella Científica	32
4.2. Els Serveis Addicionals	35
4.3. La connectivitat de RedIRIS	41
4.4. El Punt Neutre d'Internet de Catalunya	42
4.5. Altres serveis	43
5. La promoció.....	45
5.1. Formació	45
5.2. Difusió	47
Annexos	
I. Els acrònims	49
II. Els òrgans de govern i els assessors	51
III. Els projectes de supercomputació de més consum	61
IV. Les publicacions realitzades pels projectes	71
V. Els visitants dels programes de mobilitat	91
VI. Les tesis doctorals més consultades	97
VII. Les institucions adherides a l'Anella Científica	111
VIII. Els servidors allotjats i hostatjats	115
IX. Les visites rebudes	117
X. El sumari dels webs	119
XI. Les portades del web	131
XII. Les novetats del web	143
XIII. La formació	147

1. Les activitats de 2004

Com els anys anteriors, els serveis del CESCA s'han continuat expandint principalment en l'àrea de les comunicacions: quatre noves incorporacions a l'Anella Científica (que han fet incrementar el nombre d'institucions connectades a 49), 17 nous punts d'accés, dos nous ISP al Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX) i deu nous servidors allotjats o hostatjats. També ha augmentat el nombre d'universitats que difonen les seves tesis doctorals a través del servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

A més d'aquest creixement en el nombre d'institucions usuàries dels nostres serveis, l'any 2004 ha suposat l'ampliació del patronat del CESCA, el qual s'havia mantingut estable des del 1998, amb la incorporació com a membre de ple dret de la Universitat Ramon Llull (URL), la primera universitat privada que en forma part.

Per continuar ampliant l'abast dels nostres serveis i millorar-ne el seu ús, s'ha revisat la política d'adhesió a l'Anella Científica, d'una banda, per autoritzar la incorporació de parcs científics i tecnològics i, de l'altra, per crear la figura dels centres vinculats a institucions ja adherides. També s'ha ampliat l'equipament de supercomputació amb l'adquisició a Silicon Graphics (SGI) d'un Altix 3700 Bx2 amb 80 processadors, així com s'ha renovat l'equip central de comunicacions, un Cisco Catalyst 6513, per poder aportar més funcionalitats.

La figura 1 mostra els serveis oferts en les tres àrees d'actuació del CESCA: supercomputació, comunicacions i promoció. Per cadascun, s'indiquen en verd les altes produïdes; en groc, les modificacions realitzades (increments de cabal), i, en vermell, les baixes.

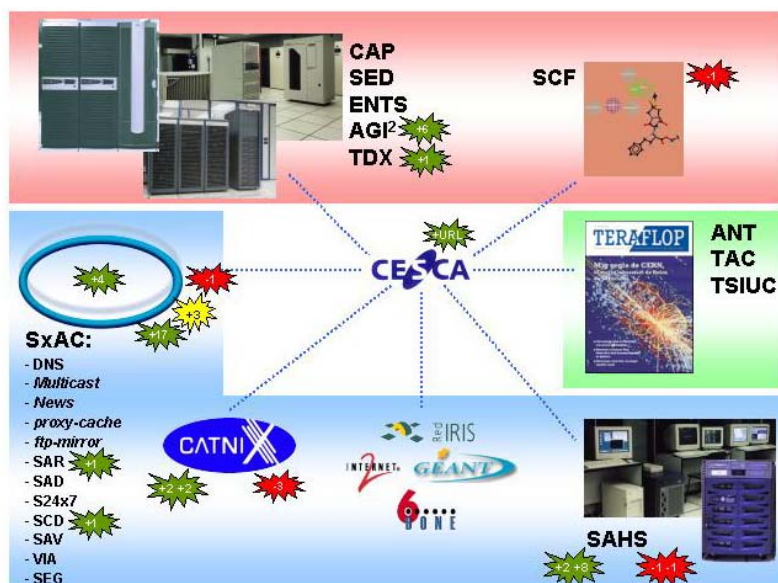


Figura 1. Els nostres serveis

L'equipament adquirit per concurs públic a SGI a la fi del 2004 disposa de 80 processadors Itanium2, 240 GB de memòria principal i 5,13 TB de disc. Setze dels vuitanta processadors han estat cedits per SGI en col·laboració d'Intel. Aquest supercomputador té un rendiment punta (R_{punta}) de 512 Gflop/s, quasi el triple de l' R_{punta} global del Centre.

A conseqüència del retard en l'anunci de licitació i, per tant, en la instal·lació del nou equipament de càlcul, els indicadors de qualitat de servei de supercomputació han empitjorat un any més. Tots els supercomputadors del Centre registren un nivell d'utilització de més del 90%, fent pràcticament inviable l'execució de treballs paral·lels de més de dos processadors i allargant el temps d'espera pels treballs amb grans requisits de memòria i disc. La posada en marxa de l'Altix el febrer de 2005 hauria de permetre reduir aquest temps d'espera i oferir un millor servei, encara que no cobrirà completament la creixent demanda de potència de càlcul que requereixen els grups de recerca en les diferents àrees de coneixement a què dona servei el CESCA.

A més d'aquesta adquisició, s'ha ampliat la memòria de l'HPC320 de 20 a 28 GB i s'ha incrementat l'espai en disc al subsistema EVA 2C6D-B en 7,47 TB addicionals. El robot d'emmagatzematge de dades ha augmentat la seva capacitat fins a 5,43 TB de dades, sense comprimir, amb l'adquisició de 25 cintes addicionals de 20 GB cadascuna.

Pel que fa al programari disponible als supercomputadors, hi ha 35 aplicacions, de les quals s'han instal·lat enguany quatre de noves: la base de dades PostgreSQL i el programari de química DL_POLY, GROMACS i AutoDock.

El 2004, 77 projectes han executat 30.997 treballs que han usat 735.840 hores computacionals, majoritàriament en l'àrea de química teòrica (82%). Seguint la tendència negativa que va començar el 2002, el temps d'espera en cua ha augmentat, sobretot per aquells treballs que necessiten gran quantitat de recursos. La instal·lació de l'HP GS1280 al començament del 2003, només amb 16 processadors, no va servir per millorar el temps d'espera dels treballs en cua.

Pel que fa als programes de mobilitat d'investigadors, ha finalitzat l'Improving Human Potential, que des de l'any 2000 ha permès a 129 investigadors realitzar un total de 162 estades a 37 grups de recerca catalans, i ha començat el nou programa HPC-Europa Transnational Access, que el 2004 ha permès realitzar 24 estades d'investigadors a 18 grups de recerca de Catalunya.

El servidor TDX ha rebut durant el 2004 més d'un milió de consultes. En mitjana ha tingut 99.000 consultes mensuals, cosa que representa un fort increment d'ús respecte l'any anterior (23.000 consultes mensuals). A la fi de l'any s'havien introduït al servidor 804 tesis doctorals, la qual cosa ha fet augmentar a més de 2.000 les tesis consultables al TDX. Amb la incorporació de la Universitat Ramon Llull, el 2004 participen en aquest servei dotze universitats.

En la taula de la pàgina següent es mostra l'evolució de diferents indicadors de supercomputació des de l'any 2000.

Indicadors de supercomputació	2000	2001	2002	2003	2004
Els serveis de càlcul					
Rendiment punta (Gflop/s)	70,00	70,00	134,16	170,96	690,96
Nombre de projectes	72	72	84	77	77
Hores computacionals (HC)	432.260	528.081	646.780	687.997	735.840
% HC executades en Gaussian	77%	81%	71%	59%	74%
Treballs en espera < 1 hora	64%	69%	64%	61%	46%
Treballs en espera > 24 hores	10%	8%	12%	16%	24%
Visites programes de mobilitat	41	36	51	45	25
Tesis Doctorals en Xarxa (TDX)					
Institucions participants	8	8	10	11	12
Tesis incorporades	1	289	493	558	804
Consultes realitzades (en milers)		7,69*	63,56	278,71	1.184,75
Gigabytes transferits		2,62*	26,22	397,91	4.978,92
Altres serveis					
SCF: Empreses+grups de recerca	2+4	2+7	5+9	5+9	4+9
SED: Terabytes (TB) emmagatzemats	1,84	2,75	4,25	5,96	8,06
Consultes	699	633	759	716	807

* Des del 8 de setembre.

En l'àmbit de les comunicacions, s'ha actualitzat l'equip central de l'Anella Científica i encaminador al CATNIX, un Cisco Catalyst 6513, que aporta més funcionalitats (increment de l'escalabilitat, més seguretat, qualitat de servei...). A més, el CESCA disposa d'un rang d'adreces IP propi per a les institucions de l'Anella Científica, la qual cosa facilita l'agrupament de les adreces en un sistema autònom propi. També possibilita enrutament dinàmic, cosa que permet llibertat d'elecció de proveïdor i la sortida per més d'un proveïdor simultàniament.

S'ha revisat la política d'adhesió a l'Anella Científica, d'una banda, per autoritzar la incorporació de parcs científics i tecnològics amb la finalitat de poder proporcionar servei als centres innovadors impulsats per les universitats i, de l'altra, per crear la figura dels centres vinculats a les institucions ja adherides per tal que aquestes puguin disposar del seu propi punt d'accés directe a l'Anella o el seu propi adreçament IP.

El nombre d'institucions connectades a l'Anella s'ha incrementat de 43 a 49 amb la incorporació de la Universitat Internacional de Catalunya, l'Institut Català d'Investigació Química, la Fundació Puigvert, el Museu de Vilafranca-Museu del Vi, el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya i el Barcelona Supercomputing Center. També ha signat el conveni per connectar-se la Fundació Gran Teatre del Liceu.

El nombre de punts d'accés connectats directament a l'Anella ha passat de 37 a 53, i la seva capacitat agregada s'ha incrementat de 2.653 Mbps a 3.111 Mbps. No obstant aquest creixement, el tràfic només ha crescut un 18%, un increment vegetatiu en comparació d'anys anteriors (160% el 2003, 38% el 2002, 167% el 2001, 150% el 2000...).

Els serveis de secundari del domini .es, *proxy-cache*, *news*, *ftp-mirror*, el d'accés remot, el d'hostatge i el servidor de correu propi, han estat migrats a set nous servidors, que han reduït el cost d'instal·lació i de manteniment.

Per al Servei de Seguretat Informàtica (SEG), s'ha instal·lat una eina de gestió d'incidents de seguretat, basada en programari lliure, que permet un tractament automatitzat de la informació. Aquesta eina, juntament amb el fet de disposar d'adreces IP pròpies i la regularització del sistema autònom, han fet que es tingui un major control dels incidents de seguretat.

Per al Servei de Certificació Digital (SCD), s'ha signat un conveni amb CATCert per constituir el CESCA com una Entitat de Registre Col·laboradora de l'Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca i detallar la política i els procediments d'aquesta. S'ha incorporat l'IRTA com a entitat usuària i s'han lliurat els primers certificats digitals. A més, el CESCA participa en el projecte TUNA, per fer una prova pilot i crear entitats de registre internes a les universitats, així com impulsar el desenvolupament d'aplicacions que facin ús de la certificació digital.

A la fi del 2004 el Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX) comptava amb 17 entitats connectades i tres més havien signat el conveni d'incorporació. El tràfic intercanviat al CATNIX ha augmentat un 52%, i ha passat de 667,75 TB el 2003 a 1.014,67 el 2004. Aquesta xifra és equivalent a transferir vint vegades tot el text d'una Gran Enciclopèdia Catalana cada minut. La taula següent mostra l'evolució dels indicadors de comunicacions.

Indicadors de comunicacions	2000	2001	2002	2003	2004
Anella Científica					
Institucions adherides	37	38	41	47	51
≥ 500Mbps				4	6
de 100 a 155 Mbps	3	3	3	11	12
de 10 a 34 Mbps	11	13	15	16	21
de 2 a 4 Mbps	8	6	8	2	3
< 2 Mbps	15	16	15	14	9
Punts d'accés (directes)	17	19	27	37	53
Capacitat agregada (Mbps)	443	543	657	2.653	3.111
Tràfic intercanviat (TB)	58,08	155,59	215,11	560,05	662,47
Serveis Addicionals (SxAC)					
Articles llegits (x10 ⁶)	13,27	8,23	5,74	3,95	0,86
Peticions al <i>proxy-cache</i> (x10 ⁶)	710,25	672,67	502,23	188,37	93,59
Peticions a l' <i>ftp mirror</i> (x10 ³)	20,64	196,79	112,34	39,75	44,14
SAR: institucions (usuaris)	12 (2.926)	11 (3.631)	11 (3.943)	12 (2.271)	13 (3.408)
SEG: incidents de seguretat				66*	205
RedIRIS					
Interconnexió amb l'Anella (Mbps)	64	155	155	1.000	1.000
Connexió a TEN/Géant (Mbps)	155	2.500	2.500	10.000	10.000
Tràfic enviat (TB)	32,99	113,45	213,40	460,79	712,14
Tràfic rebut (TB)	57,90	119,24	171,63	288,22	476,37

Indicadors de comunicacions	2000	2001	2002	2003	2004
CATNIX					
Entitats connectades	9	12	14	18	17
≥ 100 Mbps	1	2	5	8	9
de 8 a 68 Mbps	1	6	6	5	5
≤ 6 Mbps	7	4	3	5	3
Tràfic intercanviat (TB)	12,67	61,16	271,44	667,75	1.014,67
Altres serveis					
Servidors allotjats+hostatjats	5+13	5+17	8+23	11+82	11+88
Pàgines llegides al web (x10 ³)	379,60	385,97	699,93	737,90	705,53
Consultes	1.112	1.214	1.068	1.162	1.247

* Des del 6 de maig.

Pel que fa a la promoció, la vuitena Trobada de l'Anella Científica (TAC), celebrada a l'Institut Cartogràfic de Catalunya, ha tractat temes com ara la seguretat informàtica, la certificació digital i la infraestructura de dades espacials de Catalunya. Mentre que les anteriors edicions de la TAC sempre havien tingut lloc en un escenari universitari, per primera vegada ha estat un centre de recerca connectat a l'Anella qui ha acollit la Trobada.

Sota el títol “La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos” va tenir lloc la cinquena edició de la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC) a l'IN3 de la UOC, a Castelldefels. La TSIUC va oferir diferents elements per a l'anàlisi dels beneficis de l'ús de la certificació digital.

A més, s'ha organitzat una Aula de Noves Tecnologies, que ha comptat amb tres cursos, un seminari i cinc conferències, activitats que han comptat amb l'assistència en total de més de 350 persones. Com cada any, s'ha participat en la Setmana de la Ciència, organitzada per la Fundació Catalana per a la Recerca, amb la celebració d'una Jornada de Portes Obertes. A més, el CESCA ha rebut també visites provinents d'universitats i de centres d'ensenyament secundari, de forma que un total de 277 persones han pogut conèixer el Centre.

S'ha continuat dedicant esforços per potenciar la difusió del CESCA i de les seves activitats tant a través dels mitjans de comunicació com de la revista del Centre, *Teraflop*, de la qual s'han publicat sis números. A la taula següent es presenta l'evolució dels indicadors de promoció.

Indicadors de promoció	2000	2001	2002	2003	2004
Conferències	32	29	21	14	14
Cursos Aula (assistents)	8 (185)	2 (12)	1 (19)	3 (92)	3 (90)
Jornades i seminaris (assistents)	6 (353)	4 (231)	6 (345)	5 (394)	3 (288)
Visites al Centre (visitants)	16 (277)	17 (301)	16 (318)	8 (183)	10 (277)
<i>Teraflop</i>	9	6	6	6	6

2. Els òrgans de govern i els assessors

Els òrgans de govern, els assessors, les comissions i els grups de treball 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 del 2004. A l'annex II s'inclou la relació detallada dels membres de cada comissió.

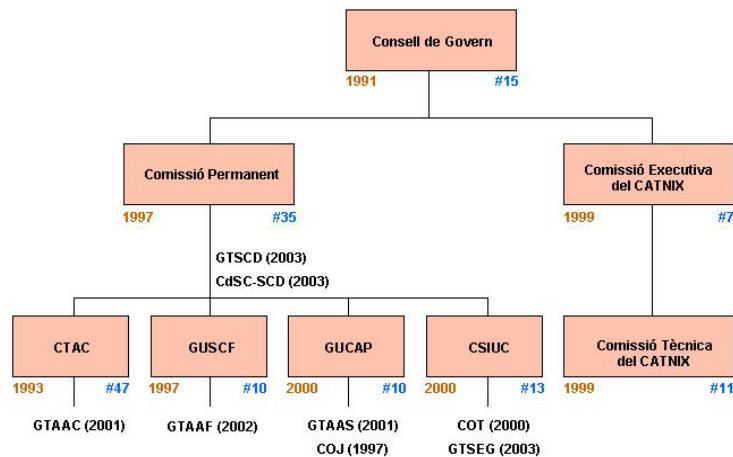


Figura 2. Els òrgans de govern i els assessors

2.1. Els òrgans de govern

El **Consell de Govern** s'ha reunit el 6 de maig per fer balanç de les activitats realitzades, aprovar la Memòria econòmica de 2003, el Pla de treball i el pressupost per al 2004, i acceptar la sol·licitud d'incorporació de la Universitat Ramon Llull (URL) al Consorci.

Després de les eleccions parlamentàries catalanes de l'octubre de 2003, el Dr. Enric Banda i Tarradellas, director de la Fundació Catalana per a la Recerca, ha substituït el Dr. Lluís Jofre i Roca en el càrrec de secretari del Consell de Govern del CESCA i en el de vicepresident de la Comissió Permanent, amb data efectiva de 28 de gener.

De la mateixa manera, el Sr. Oriol Ferran i Riera, secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació (DURSI), ha substituït el Sr. Jordi Alvinyà i Rovira tant a la vocalia del Consell de Govern com a la presidència de la Comissió Executiva del CATNIX, mentre que el Sr. Narcís Mir i Soler, subdirector general d'Indústria, ha substituït el Sr. Antoni Gurguú i Ferrer en la vocalia del Consell de Govern i en la vicepresidència de la Comissió Executiva del CATNIX. També el Dr. Antoni Oliva i Cuyàs ha estat substituït per la Dra. Marta Aymerich i Martínez, directora de la CIRIT, en la vocalia del Consell de Govern i en la presidència de la Comissió Permanent. Totes aquestes substitucions han tingut data efectiva de 23 de gener.

Posteriorment, la Dra. Marta Aymerich i Martínez ha estat reemplaçada en la vocalia del Consell de Govern pel Dr. Francesc Xavier Hernández i Cardona, director general de Recerca, amb data 2 de juny. Aquesta substitució va ser duta a terme perquè el conseller d'Universitats, Recerca i Societat de la informació va considerar pertinent que fos el director general de Recerca, que és qui proveeix el CESCA d'una part del seu pressupost, qui ocupés una de les tres vocalies del Consell de Govern que corresponen al DURSI.

Així mateix, després que el Consell de Govern aprovés la sol·licitud d'incorporació de la URL al Consorci, i que el president del CESCA, Sr. Rafael Español, i la rectora de la URL, Dra. Esther Giménez-Salinas, signessin el conveni per fer efectiva aquesta integració el 14 de juny, la rectora Giménez-Salinas ha passat a ocupar una vocalia del Consell de Govern.

La **Comissió Permanent** s'ha reunit en cinc ocasions els dies 23 de febrer, 21 d'abril, 16 de juliol, 15 d'octubre i 17 de desembre per coordinar les activitats desenvolupades. Amb la voluntat de concentrar les representacions del Centre, el secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació, el Sr. Oriol Ferran i Riera, que és president de la Comissió Executiva del CATNIX i vocal del Consell de Govern, ha substituït la directora de la CIRIT en la presidència d'aquesta comissió en data 2 de juny.

Les vocalies rotatòries han anat a càrrec del Dr. Francesc Gòdia i Casablanca, de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB); la Dra. Cristina Barrado i Muxí, de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC); el Dr. Daniel Serra de la Figuera, de la Universitat Pompeu Fabra (UPF); el Dr. Joaquim Salvi i Mas, de la Universitat de Girona; i des del 6 de maig, el Dr. Antoni González i Senmartí, de la Universitat Rovira i Virgili (URV).

A conseqüència de la incorporació de la URL al Consorci, el nombre de vocalies de la Comissió Permanent s'ha incrementat de quatre a cinc. Per aquest motiu, el representant de la URV va incorporar-se el 6 de maig, data en què el Consell de Govern va aprovar la incorporació de la URL i, com a conseqüència, l'ampliació d'una vocalia tant al Consell de Govern com la Comissió Permanent. Seguint l'ordre rotatori d'ocupació de vocalies, aquesta nova correspon fins a la propera renovació a la URV.

Pel que fa a la **Comissió Executiva del CATNIX**, el Sr. Oriol Ferran i Riera, Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació, ha presidit la sisena i setena reunions celebrades el 19 de juliol i el 13 de desembre, respectivament, per fer balanç del funcionament del Punt Neutre i debatre les noves activitats a desenvolupar al llarg del 2005.

Quant a les vocalies, el Sr. Gonçal Bonhomme i Altable ha substituït el Sr. Arnold Ghinsberg com a representant d'Al-Pi Telecomunicacions l'1 de juliol, el Sr. Tomàs Domínguez i Balcells ha reemplaçat el Sr. Joris Siroo en representació de Jazztel el 10 de desembre, el Sr. Ramón Santocildes i Castañón ha assumit la representació de Colt Telecom Barcelona en el lloc del Sr. Ginés Alarcón i Martínez el 9 de gener, el Sr. Juan Manuel Jiménez Mendaño ha rellevat el Sr. Rafael Fernández Vegue com a representant de Telefónica el 14 de juliol, i el Sr. Alberto Pérez Gómez ha reemplaçat el Sr. Víctor Castelo Gutiérrez en la representació de RedIRIS el 28 de febrer.

A més, s'han incorporat a la comissió els representants de les entitats que s'han afegit al Punt Neutre: el Sr. Jordi Compte i Batista, de Flash10, el 13 d'octubre, i el Sr. Javier León Núñez, d'Iberbanda, el 25 de novembre. Per la seva banda, el 3 de febrer es donava de baixa l'Institut Català de Tecnologia, el 25 de febrer ho feia Datagrama, i el 13 de desembre, Intelideas.

2.2. Els òrgans assessors

La Comissió Tècnica de l'Anella Científica (**CTAC**) s'ha reunit els dies 3 de març i 21 d'octubre per fer el seguiment de l'Anella Científica. El Sr. Jordi Collado i Calpe ha substituït el Sr. Boris Martínez i Suárez com a representant de la UPC el 25 de maig, el Sr. Francesc Iglesias i García ha reemplaçat la Sra. Gemma Casasampera i Fernández per representar l'Hospital Universitari Vall d'Hebron el 6 de setembre, i el Sr. Ruben Borja i Lledós ha substituït el Sr. Francesc Guillen i Martínez com a representant de la Universitat Abat Oliba CEU.

A més, a aquesta comissió s'han incorporat el Sr. Manel Peña i Camacho de l'Institut d'Estudis Catalans, el Sr. Miquel Pontes i García de la Fundació Puigvert, el Sr. Sebastià Caro i Gómez de l'Hospital General de Vic, el Sr. Manel Gallegos i Navarro de l'Institut d'Estadística de Catalunya, el Sr. Jordi Varela i Agrelo de l'Escola Superior de Música de Catalunya, i la Sra. Julia Osorio i Ortega de la Fundació del Gran Teatre del Liceu, mentre que el 20 de febrer s'ha donat de baixa la Sra. Montserrat Camps i Pi, en deixar el seu càrrec a la URL, la qual no ha estat substituïda en el 2004.

El Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors (**GUSCF**) s'ha reunit el dia 22 de juny per fer el seguiment d'aquest servei i debatre el seu possible creixement. El 2 de gener LÁCER S.A. va ser baixa en aquest servei.

La Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (**GUCAP**) s'ha reunit els dies 24 de març i 21 de desembre per fer balanç dels serveis de supercomputació rebuts i debatre la prioritització de treballs en cua de manera que sigui més alta per a aquells projectes amb més hores disponibles. El Sr. Bernat Codina i Sánchez, de la Universitat de Barcelona, va sol·licitar la seva baixa per raons personals el 16 de novembre.

La Comissió dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (**CSIUC**) s'ha reunit en dues ocasions: el 19 de maig i el 24 de novembre, per debatre i reflexionar sobre els serveis del CESCA a la comunitat universitària i les pròpies experiències en la gestió acadèmica, i per coordinar l'elaboració dels programes per a les trobades TAC i TSIUC. Pel que fa als seus integrants, el Sr. Lluís Ariño i Martín ha substituït el Sr. Francesc Salvador i Carvajal com a representant de la Universitat Rovira i Virgili el 10 de setembre.

La Comissió Tècnica del CATNIX (**PN/T**) s'ha reunit els dies 2 de juliol i 26 de novembre per analitzar i debatre els temes que afecten al funcionament del Punt Neutre. S'han incorporat a la comissió el Sr. Jordi Hortigüela i Bodi, de Flash10, i el Sr. Santiago Cano Serrano, d'Iberbanda, mentre que el 3 de febrer s'ha donat de baixa l'Institut Català de Tecnologia, el 10 de juny ho ha fet Datagrama, i el 13 de desembre, Intelideas.

2.3. Les comissions i grups de treball

La Comissió Organitzadora de les Trobades TAC/TSIUC (**COT**) s'ha reunit el 27 de juliol i el 27 de setembre per definir els programes d'aquestes Trobades, celebrades a l'Institut Cartogràfic de Catalunya i a l'IN3 de la Universitat Oberta de Catalunya (UOC), respectivament. Han format part de la COT Teresa Grané, de la UPF, Dídac López, de la UdG, Francesc Noguera, de la UOC, i el director del CESCA.

El Grup de Treball de Seguretat Informàtica (**GTSEG**) s'ha reunit els dies 15 de setembre i 17 de novembre per preparar una sol·licitud d'ofertes per elaborar una política de seguretat per a l'Anella Científica i debatre sobre temes relacionats. S'ha incorporat a aquesta comissió el Sr. Jordi Orgué i Bella, del Departament d'Educació, amb data 9 de desembre. Pel que fa als seus integrants, el Sr. Zacarías Sánchez Muñoz ha substituït el Sr. Jordi Mas i Parareda com a representant de la UPF amb data 3 de desembre.

El Grup de Treball del Servei de Certificació Digital (**GTSCD**) s'ha reunit en cinc ocasions: el 6 de febrer, el 12 de març, el 21 d'abril, el 23 de juny i el 30 de setembre. El GTSCD ha tractat la implementació del servei a les institucions i ha reflexionat sobre com impulsar-hi l'ús dels certificats digitals. Pel que fa als seus integrants, la Sra. Sílvia Nolla i Lacruz ha substituït el Sr. Ernest Trias i Ferrer com a representant de la UB amb data 7 de juliol, el Sr. Gonzalo Ruiz i Marín ha reemplaçat el Sr. Francisco J. Navallas i Ramos en la representació de la UPC amb data 7 de juliol, el Sr. Miquel Casademont i Donay ha substituït el Sr. Salvador Bramon i Sunyer com a representant de la UdG amb data 21 de juny, i el Sr. Lluís Ariño i Martín ha reemplaçat la Sra. Àngels Olivé i Conde en la representació de la URV amb data 28 de setembre.

La Comissió de Seguiment i Control del Servei de Certificació Digital (**CdSC-SCD**) s'ha reunit els dies 30 de gener, 14 d'abril, 19 de juliol i 15 de desembre, i ha aprovat el pla de projecte de l'Entitat de Certificació d'acord amb el GTSCD, ha aprovat la documentació del projecte, incloent-hi la Declaració de Pràctiques de Certificació i la documentació contractual corresponent, i ha fet el seguiment dels treballs d'implantació del Servei de Certificació Digital.

El Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Supercomputació (**GTAAS**) s'ha reunit en tres ocasions, els dies 1 d'octubre, 25 de novembre i 13 de desembre, en primer lloc per revisar el Plec de Clàusules Administratives Particulars per l'anunci de licitació per la renovació de l'equipament de supercomputació i posteriorment per avaluar les diferents ofertes rebudes.

El Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Comunicacions (**GTAAC**) s'ha reunit en quatre ocasions, els dies 17 de març, 28 d'abril, 25 de maig i 7 de juliol, per avaluar la renovació de l'equipament de l'Anella i dels serveis addicionals. A més, també ha debatut el document a signar per les institucions vinculades i les condicions per adherir-se a l'Anella dels parcs científics i tecnològics.

3. La supercomputació

El maquinari de supercomputació ha permès als investigadors realitzar càlculs de gran envergadura que han fet avançar la seva recerca, en àrees com ara la química teòrica, la modelització biomolecular, la física, els mètodes numèrics en enginyeria i les ciències de la Terra. Investigacions sobre l'estructura electrònica de les molècules, cristalls moleculars d'interès tecnològic, reconeixement molecular, reaccions implicades en química atmosfèrica i en processos de combustió, química d'hidrurs de metalls de transició, i l'estructura d'enzims i la catàlisi que produeixen han usat milers d'hores computacionals per tal de trobar nous materials, avançar en el tractament de malalties o reduir l'impacte de l'ésser humà en el medi ambient.

Els 77 projectes de recerca han usat més de set-centes mil hores computacionals (HC), les quals els han permès avançar en les seves diferents línies de recerca. Com explica el Dr. Agustí Lledós, del Dept. de Química de la UAB, la seva recerca ha estat afavorida per "l'atmosfera de col·laboració entre grups de l'àmbit de la química teòrica, a la que ajuda notablement l'existència del CESCA, la qual ha permès també engregar estudis computacionals en col·laboració amb altres grups teòrics catalans". Tant el Dr. Lledós com el Dr. Francesc Illas, del Dept. de Química Física de la UB, destaquen la importància de comptar amb els programes de mobilitat per avançar en la seva recerca, ja que aquests programes del CESCA-CEPBA permeten la col·laboració amb col·legues estrangers.

Per al Dr. Modesto Orozco, del Dept. de Bioquímica i Biologia Molecular de la UB, "el suport computacional del CESCA ens ha permès progressar en l'estudi teòric de sistemes bioquímics, tant des d'un vessant de la modelització com de la bioinformàtica, amb importància biomèdica".

Tant el Dr. Carlos Alemán, del Dept. d'Enginyeria Química de la UPC, com el Dr. Juan José Novoa, del Dept. de Química Física de la UB, han usat els recursos computacionals per avançar en el disseny de nous materials treballant amb polímers. El primer ha avançat en l'estudi de propietats físiques com ara solubilitat i viscositat, mentre que el segon ho ha fet en el magnetisme.

El Dr. Jordi Torra, de l'IEEC, destaca els nombrosos tests i anàlisis del sistema de reducció de dades realitzades al maquinari del CESCA per al projecte GAIA. Aquestes experiències han culminat amb una prova de GIS (Global Iterative Solution) amb dades de 200.000 estrelles per a 18 mesos de missió.




El 2004, cinc investigadors que són o han estat usuaris del Centre han vist reconeguda la seva tasca amb una distinció del DURSI. Han estat distingits els Drs. Francesc X. Avilés (UAB), Manuel Barranco (UB), Agustí Lledós (UAB), Núria López i Alonso (UB) i Ignasi Pagonabbarraga (UB). Ha estat premiat també el Dr. Francesc Illas (UB) amb el Premi de la Real Sociedad Española de Química en l'àrea de la química física.

A més de proporcionar eines per a la recerca, el Centre també ha facilitat, amb la col·laboració del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC), l'accés a la producció científica pròpia de cada universitat, les tesis doctorals, amb el servei de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) que, després de l'increment de visibilitat durant el 2003, el 2004 ha augmentat considerablement el nombre de consultes i ha superat el milió. Aquest servidor contenia a la fi de l'any més de 2.000 tesis doctorals.

En les seccions següents es descriuen el nou maquinari, el programari i els serveis prestats (càlcul, cerca de farmacòfors, emmagatzematge de dades, TDX, etc.).

3.1. El maquinari

A la fi del 2004 s'ha adjudicat a Silicon Graphics (SGI) el concurs públic per a la instal·lació de maquinari de supercomputació. L'equipament adquirit a SGI consisteix en un Altix 3700 Bx2 amb 80 processadors Itanium2 de 64 bits, a 1,6 GHz i amb 6 MB de memòria cau de tercer nivell, amb un total de 240 GB de memòria principal i 5,13 TB de disc (figura 3). Aquest supercomputador té un rendiment punta de 512 Gflop/s. Amb l'adquisició del nou maquinari el rendiment punta global del Centre ha passat de 177 a 691 Gflop/s (figura 4). Setze dels vuitanta processadors han estat cedits per SGI en col·laboració d'Intel.

<p>IBM SP2[*]</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 42 thin160 (160 MHz, 128 KB) + 2 wide (66 MHz, 256 KB) ▪ HPS (12 a 80 MB/s), SP Switch (32 a 160 MB/s) ▪ 12 GB; 494 GB; 27,41 Gflop/s <p>HP V2500</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 16 PA-8500 (440 MHz, 1 MB) ▪ 8 GB; 216 GB; 28,16 Gflop/s <p>HP N4000</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 8 PA-8500 (440 MHz, 1 MB) ▪ 4 GB; 227 GB; 14,08 Gflop/s <p>CPQ AlphaServer HPC320</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 32 EV68 (833 MHz, 64 KB, 8 MB) [8 ES40] ▪ Memory Channel II (100 MB/s) ▪ 28 GB; 892 GB; 53,31 Gflop/s <p>CPQ beowulf</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 8 EV67 (600 MHz, 64 KB, 2 MB) [8 DS10] ▪ Myrinet (2 Gbps) ▪ 4 GB; 291 GB; 9,80 Gflop/s 		<p>HP AlphaServer GS1280</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 16 EV7 (1.150 MHz, 64 KB, 1 MB) ▪ 32 GB; 655 GB; 36,80 Gflop/s <p>HP rx2600</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 2 Itanium2 (1.000 MHz, 32KB, 256 KB, 3 MB) ▪ 2 GB; 146 GB; 8,00 Gflop/s <p>SGI Octane</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 2 R12000 (400 MHz, 32 KB, 2 MB) ▪ 704 MB; 49 GB; 1,60 Gflop/s <p>SGI Altix 3700 Bx2</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 80 Itanium2 (1,6 GHz, 16 KB, 0,256 MB, 6 MB) ▪ 240 GB; 5,13 TB; 512,00 Gflop/s <p>HP EVA V.2 2C6D-B</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ FC 10,17 TB ▪ 2 FC 2 Gbps HSV110
 		

***7 nodes fora de servei**

Figura 3. El maquinari de càlcul disponible

La posada en funcionament de l'Altix al febrer del 2005 hauria de satisfer la creixent demanda de potència de càlcul que requereixen els grups de recerca en les diferents àrees de coneixement a què dona servei el CESCA. Tots els supercomputadors del Centre registren un nivell d'utilització de més del 90%, fent pràcticament inviable l'execució de treballs paral·lels de més de dos processadors i allargant el temps d'espera pels treballs amb grans requisits de memòria i disc. El nou maquinari, que aportarà 350.000 HC, ajudarà a alleujar tots aquests problemes i compensarà les 161.000 HC perdudes amb l'aturada de l'IBM SP2 a mitjan gener de 2005.

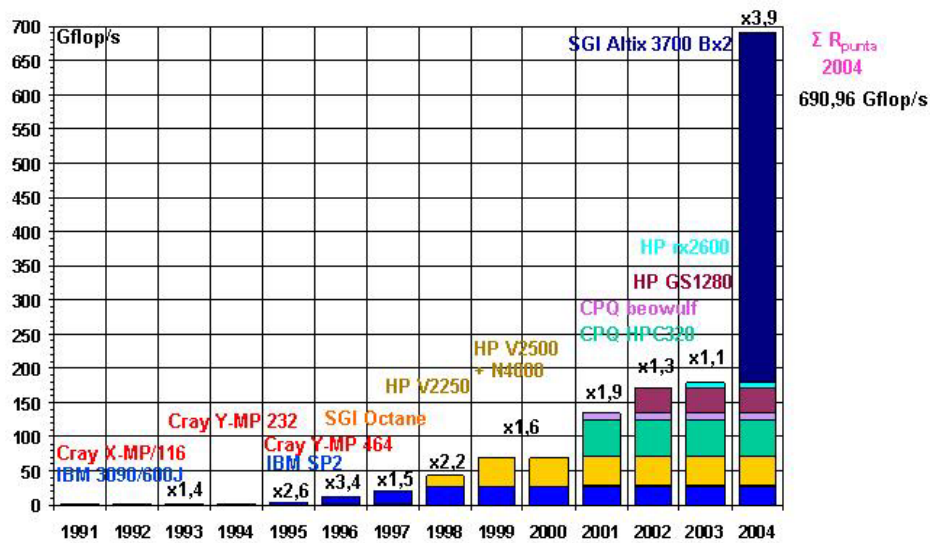


Figura 4. El maquinari disponible: una visió històrica

L'elecció del sistema Altix ha estat feta amb la voluntat d'oferir com a centre de supercomputació un servei que sigui capaç de complementar allò que els usuaris poden aconseguir per altres vies. Els superclústers Altix són multiprocessadors simètrics de memòria distribuïda compartida que proporcionen un entorn de treball flexible i competitiu per a les aplicacions característiques dels usuaris del CESCA.

En comparació amb un clúster clàssic, un superclúster permet virtualment treballar amb qualsevol dimensió de node que es desitgi, sense que cap aplicació típica de clúster (programada amb PVM o MPI) deixi de funcionar. Té com a avantatges addicionals que el grau de paral·lelisme no està limitat al número de processadors dels nodes, i que no presenta restriccions de memòria, que és compartida d'una forma altament eficient per l'enorme amplada de banda i la reduïda latència de les comunicacions internes.

Els sistemes Altix estan basats en els processadors Intel Itanium2, la qual cosa assegura la compatibilitat durant anys de la plataforma més estàndard del mercat. És la segona generació de processadors dissenyada específicament per a l'arquitectura de 64 bits d'Intel. L'arquitectura d'aquests processadors és de tipus EPIC (Explicitly Parallel Instruction Computing), que permet l'execució explícita en paral·lel d'un conjunt d'instruccions mitjançant l'ús intel·ligent del compilador. El seu disseny permet suportar arquitectures escalables i latències variables en l'accés a memòria, ja que aquesta es veu reduïda per l'ús de tres nivells de memòria cau en el propi xip, entre altres coses.

La família de servidors SGI Altix inclou el primer sistema operatiu Linux del món que suporta memòria global compartida a través de nodes de fins a 512 processadors en una sola imatge de sistema operatiu per node i un avançat entorn de desenvolupament especialment optimitzat per a aplicacions tècniques. SGI ha contribuït a millorar funcionalitats del sistema operatiu Linux, distribució de Red Hat Enterprise (RHEL) versió 3.0, proporcionant-li una escalabilitat sense precedents en un entorn de codi font obert.

Les característiques tècniques dels diferents processadors disponibles són les següents:

	V2500 PA-8500	N4000 PA-8500	Beowulf EV68	HPC320 EV68	GS1280 EV7	rx2600 Itanium2	Altix 3700 Itanium2
Freqüència (MHz)	440	440	600	833	1.150	1.000	1.600
Amplada bus	64	64	64	64	128	128	128
Cau (L1 KB/L2 MB/L3 MB)	1.024/-/-	1.024/-/-	64/2/-	64/8/-	64/1,75/-	32/0,25/3	16/0,256/6
R _{punta} (Gflop/s)	1,76	1,76	1,20	1,67	2,30	4,0	6,40
LINPACK TPP	1,05	1,29	0,88	1,28	1,90	3,53	5,94
LINPACK 100x100	0,38	0,38	0,47	0,64	0,95	1,10	1,77
SPECint95/2000	n/d	34,0/-	34,4/355	50,0/565	-/900	-/-	-/1.441
SPECfp95/2000	n/d	51,4/-	54,6/400	100,0/777	-/1.450	-/1.427	-/2.647
CESCA/QT	2,26*	3,31*	3,44**	6,54**	9,10**	10,44**	17,70***
CESCA/MM	n/d	n/d	1,04	1,64	2,37	2,39	3,84
CESCA/B	n/d	n/d	2,82	5,19	7,27	8,16	13,72

En cursiva, números estimats.

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

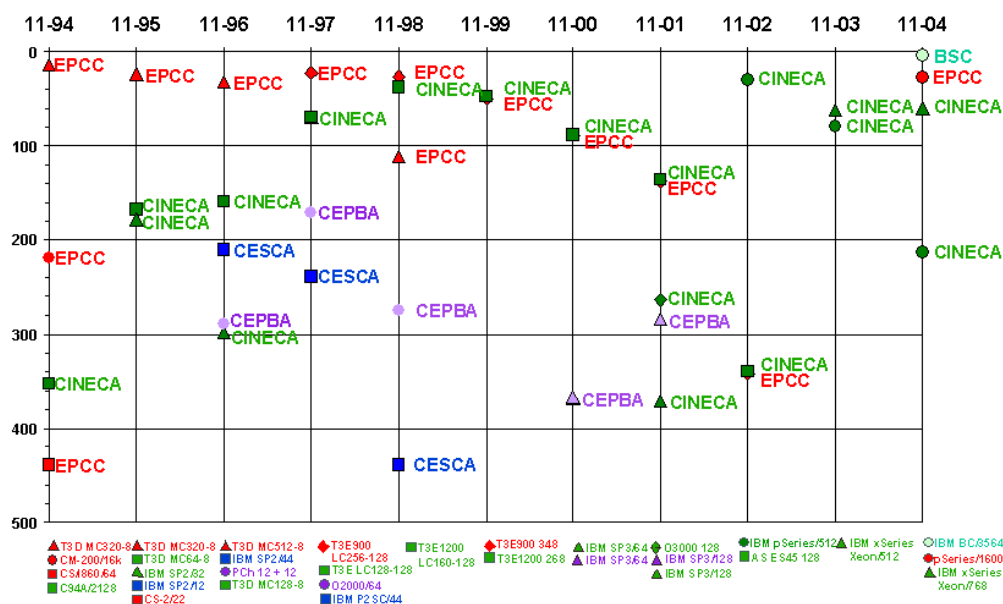
Els resultats dels nostres *benchmarks* són diferents dels publicats a la memòria del 2003 ja que aquests corresponen a la versió actual de Gaussian98 i Amber disponibles a cada màquina. Els QT per al V2500 i l'N4000 són inferiors als de l'any passat (2,53 i 3,65, respectivament) en canviar la versió A.7 a A.11, mentre que per al beowulf, l'HPC320 i el GS1280 són tots superiors (3,22, 6,16 i 8,86) en canviar a la nova versió de Gaussian03 B.02.

D'altra banda, en canviar la versió d'Amber 5.01 a 7 s'ha hagut de canviar el fitxer de dades d'entrada per resoldre un problema similar de més durada, la qual cosa ha fet reduir significativament l'*speedup* respecte a l'IBM SP2 basat en Amber 5.01. Per exemple, en el cas del GS1280 s'ha passat de 14,02 a 2,37. Per això, en mitjana, els supercomputadors han vist (aparentment) "reduït" el seu rendiment.

A més de l'adquisició de l'Altix, s'ha ampliat la memòria de l'HPC320 de 20 a 28 GB, duplicant de 2 a 4 GB la memòria de quatre nodes. Per tal d'aconseguir el rendiment més òptim, s'han ocupat totes les ranures DIMM disponibles en aquests nodes, que tenien mòduls DIMM de 128 MB, per mòduls DIMM de 256 MB. Un cop fet aquest canvi, sis dels vuit nodes disposen de 4 GB de memòria.

Al subsistema de discos EVA s'ha ampliat l'espai del projecte GAIA amb 4 TB nets addicionals. S'hi han substituït els 24 discos dual-port 2 Gbps FC-AL de 72,8 GB de 10.000 rpm que conformen el disc virtual d'1 TB net del projecte GAIA per 60 nous discos dual-port 2 Gbps FC-AL de 146,8 GB i 10.000 rpm per tal d'obtenir així un total de 5 TB nets per al projecte. A més, HP ha donat 8 dels 24 discos retirats de 72,8 GB que s'han utilitzat per ampliar alguns sistemes de fitxers com ara */home* i */prod*. Amb aquesta ampliació, l'EVA ha passat de 2,70 TB a 10,17 TB bruts d'espai.

De les quatre 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), apareixen a la llista TOP500 que recull els 500 supercomputadors més potents del món, el Barcelona Supercomputing Center (BSC) amb un IBM eServer BladeCenter JS20 amb 3.564 processadors a la quarta posició, el centre italià CINECA a les posicions 60 i 213, amb un IBM BladeCenter HS20 Xeon de 768 processadors i un IBM pSeries 690 Turbo de 512 processadors, respectivament, i l'EPCC anglès a la posició 27 amb un IBM eServer pSeries 690 amb 1.600 processadors (figura 5).



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

Figura 5. Grans Instal·lacions de Supercomputació

El 2004 ha acabat amb dos empreses de l'Estat al TOP500, Carrefour a la posició 269 amb un HP Integrity Superdome de 256 processadors, i Vodafone a la posició 441 amb un HP Superdome 875 MHz/HyperPlex de 480 processadors. El Centro de Supercomputación de Galicia va estar present a la llista fins el juny de 2004, amb el seu HP Integrity Superdome de 128 processadors, que havia entrat a la llista el novembre de 2003 (figura 6).

Pel que fa a l'entorn de treball (figura 7), per tal de permetre l'intercanvi de treballs entre totes les màquines del clúster LSF (Load Share Facility) s'ha eliminat la restricció que obligava a que els treballs s'executessin en màquines binàriament compatibles amb la màquina des de la qual s'havia enviat el treball. A efectes pràctics, el clúster quedava compartimentat i per exemple un treball enviat des de *guilleries* no podia ser executat mai a *pastuira* o *montnegre*. Després d'aquest canvi, si no s'especifica cap restricció, aquest treball pot ser executat a qualsevol de les màquines del clúster independentment de la màquina des de la qual hagi estat enviat.

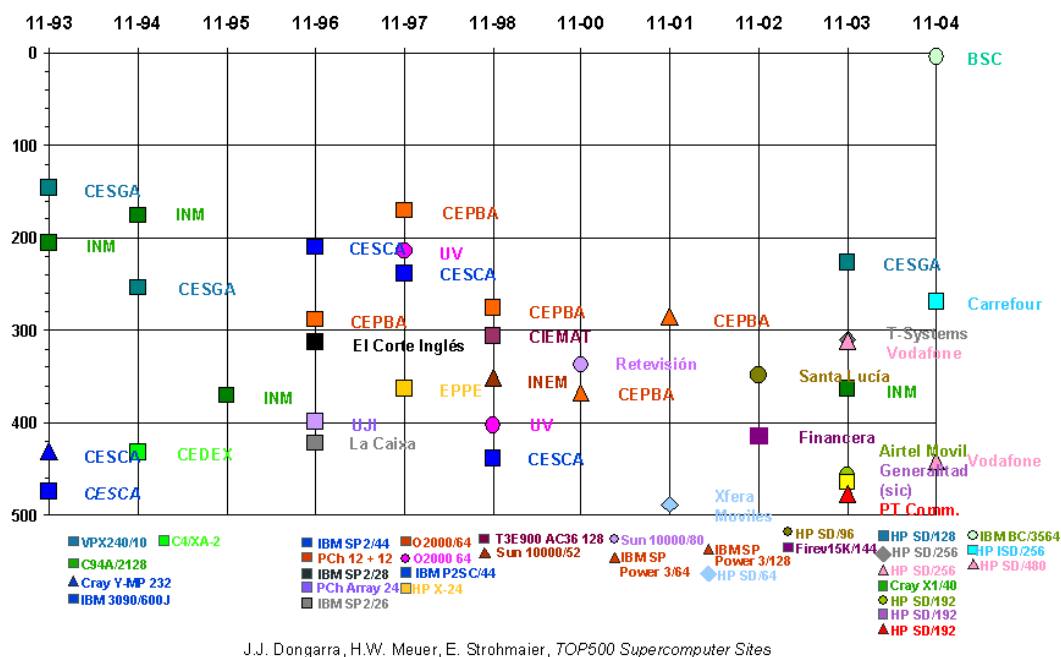


Figura 6. Centres de l'Estat a la llista TOP500

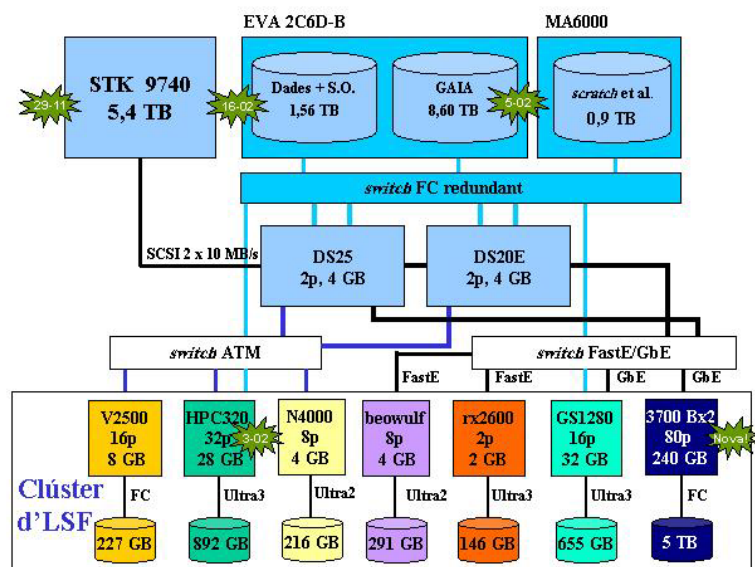


Figura 7. Connectivitat i accessibilitat

L'StorageTek TimberWolf 9740 ha estat ampliat amb 25 cintes tipus 9840 de 20 GB, que incrementen la disponibilitat del nombre de dades en 0,4 TB. Amb aquesta ampliació el robot disposa de 277 cintes en total, que es tradueixen en 5,43 TB de dades sense comprimir.

El **Museu** ha incorporat diferents peces del primer supercomputador del CESGA, el Fujitsu VP2400, que va entrar en operació el novembre de 1992. Amb aquest supercomputador, el CESGA va entrar a la posició 160 de la llista TOP500 en l'edició de juny de 1993 i va ser-hi present fins el juny de 1995.

3.2. 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 35 aplicacions disponibles (figura 8), de les quals s'han instal·lat enguany quatre de noves: la base de dades PostgreSQL i el programari de química DL_POLY, GROMACS i AutoDock.

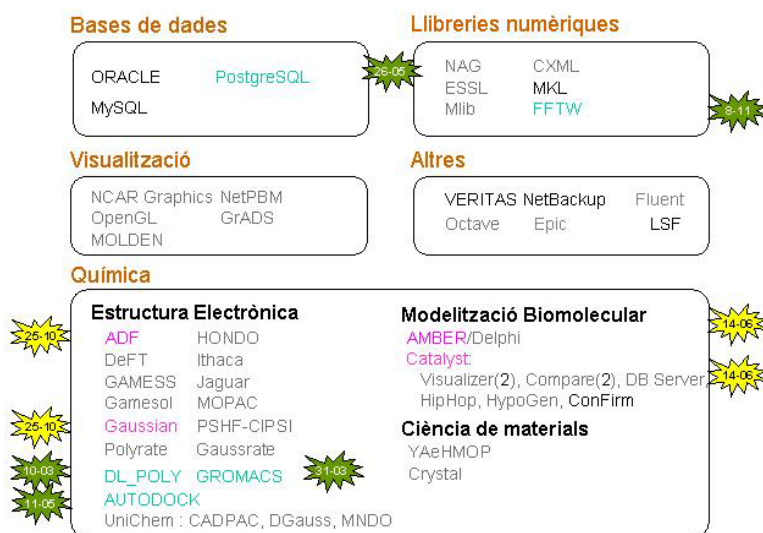


Figura 8. El programari disponible

Pel que fa al sistema operatiu, s'ha actualitzat el de l'HP AlphaServer GS1280 i el del servidor de fitxers de Tru64 5.1B Patch Kit 1 a Patch Kit 3 i a la revisió 6.6-13 de *firmware*. Al Compaq HPC320, s'ha passat de la versió 5.1A PK4 a la versió 5.1B PK3 per tal de millorar-ne l'estabilitat i funcionalitats.

Per motius de seguretat s'ha actualitzat a les màquines V2500, N4000, HPC320, beowulf, GS1280 i al servidor de fitxers les versions del programa de connexió segura Secure Shell (ssh). A les HP N4000 i V2500 hi ha la versió HP SSH A.03.61 per HP-UX basat en OpenSSH 3.6.1p2, a les HP HPC320, GS1280 i el servidor de fitxers l'HP SSH 3.2.0 per Tru64 UNIX, i al clúster beowulf hi ha OpenSSH_3.1p1 per Linux.

A les màquines HP V2500 i N4000 s'ha instal·lat la versió A.03.50 d'ANSI C i aC++, així com la versió 2.7.1 del compilador de f90, que incorpora les llibreries OpenMP v2.0 completes.

Al GS1280, a l'rx2600 i a l'HPC320 s'han instal·lat les versions 2.1.5 i 3.0.1 de la llibreria FFTW (Fastest Fourier Transform in the West), una llibreria de subrutines en C per al càlcul de transformades discretes de Fourier (DFI).

Pel que fa al programari, s'ha instal·lat a tots els servidors de càlcul (GS1280, rx2600, HPC320, beowulf, N4000 i V2500) la nova versió del programa de química quàntica Gaussian03, revisió C.02.

A les màquines HPC320, GS1280 i rx2600 s'ha instal·lat el programa de càlcul de dinàmica molecular GROMACS, versió 3.2.1. A l'HPC320 i al GS1280 a més de la versió seqüencial es disposa de la versió paral·lela MPI. GROMACS és un programa de dinàmica molecular de propòsit general especialment dissenyat per simulacions de molècules bioquímiques com ara les proteïnes i els lípids amb un gran nombre d'interaccions. En aquestes tres màquines s'ha actualitzat a la versió 2004.01 el programa ADF.

A l'HPC320 i al GS1280 s'ha instal·lat la versió 8.0, seqüencial i paral·lela MPI, del programa de modelat molecular Amber. A l'HPC320 s'ha instal·lat també el programa de *docking* AutoDock, versió 3.0.5. També en aquestes màquines s'ha instal·lat el programa de càlcul de dinàmica molecular DL_POLY 2.14, del qual es disposa de la versió seqüencial i la paral·lela MPI.

A la màquina SGI Octane, dedicada al Servei de Cerca de Farmacòfors, s'ha instal·lat la versió 4.9.1 del programa de cerca de farmacòfors Catalyst, un programa d'Accelrys que té la capacitat de definir i cercar farmacòfors (patrons) en bases de dades d'estructures químiques tridimensionals de compostos d'interès biològic. També s'hi ha instal·lat per a fer cerques amb Catalyst una versió d'avaluació reduïda (només 2.000 compostos) de la base de dades Jubilant Kinase.

A l'HP rp5430, dedicat als servidors d'Accés a Gestors d'Informació per Internet, s'ha instal·lat l'HP C/ANSI C Developer's Bundle, que correspon al compilador de C i eines associades per HP-UX 11i, l'HP OnlineJFS, que permet expandir, encongir i defragmentar dinàmicament sistemes de fitxers VxFS (Veritas Filesystem), i l'HP OpenView GlancePlus, una eina de monitoratge de rendiment i de diagnòstic que permet tant obtenir dades instantànies com recopilar dades històriques del funcionament del sistema per després ser analitzades.

3.3. Els serveis de càlcul

Les **hores computacionals** (HC) usades al maquinari del CESCA han estat 735.840, un 7% més sobre les 687.997 del 2003. Com es pot observar a la figura 9, la química teòrica continua essent l'àrea que més recursos consumeix (82%), seguida de la modelització biomolecular (10%) i la física (7%). Per institució, les tres universitats que han usat més de tres quartes parts dels recursos són la UB (27%) i la UAB i la UIB (ambdues 25%).

A l'annex III trobareu la descripció dels 30 projectes de més consum per a enguany. El programari més usat continua essent el Gaussian (un 74%), seguit de l'ADF (un 3,4%), l'Amber (un 1,6%), i el Jaguar (un 0,4%).

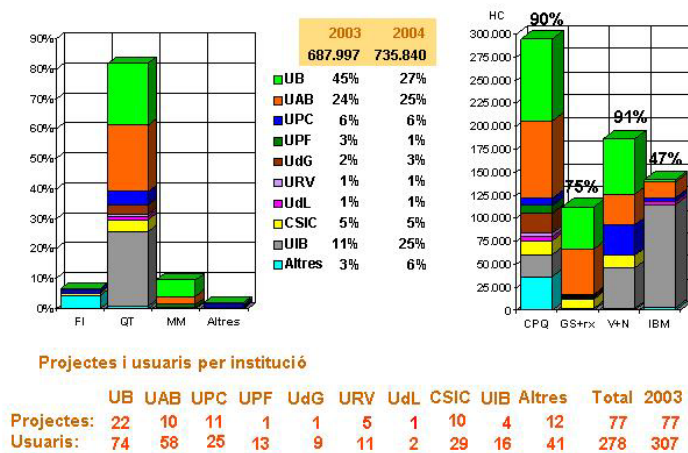


Figura 9. El consum per institució

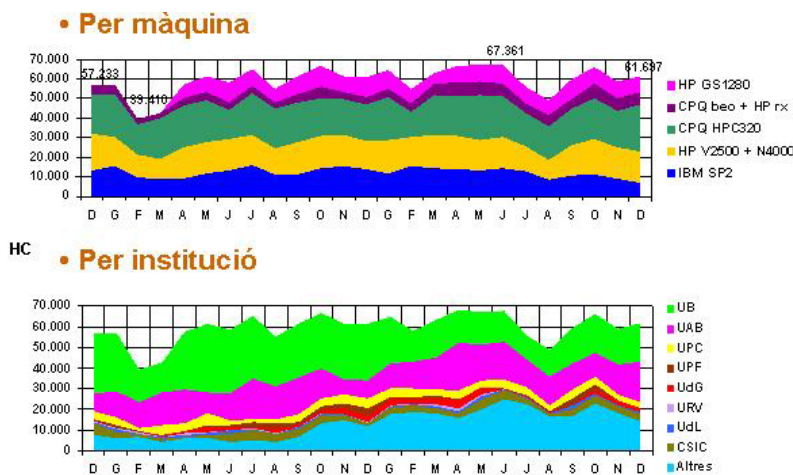


Figura 10. El consum mensual per màquina i per institució

L'ús temporal continua essent irregular entre les diverses institucions (figura 10), 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 ésser agost (48.963 HC), mentre que juny va ésser el de més consum (67.361 HC).

El **nombre de treballs executats** ha disminuït un 33%, passant de 46.101 a 30.997 (figura 11). D'aquests treballs, un 46% s'han iniciat abans d'una hora d'espera i un 24% han hagut d'esperar més de 24 hores, mentre que el 2003 els percentatges eren 61% i 16%, respectivament. La instal·lació de l'HP GS1280 al començament del 2003, només amb 16 processadors, no va servir per millorar el temps d'espera dels treballs en cua i el 2004 ha continuat la tendència negativa ja que no s'ha instal·lat nou maquinari de supercomputació.

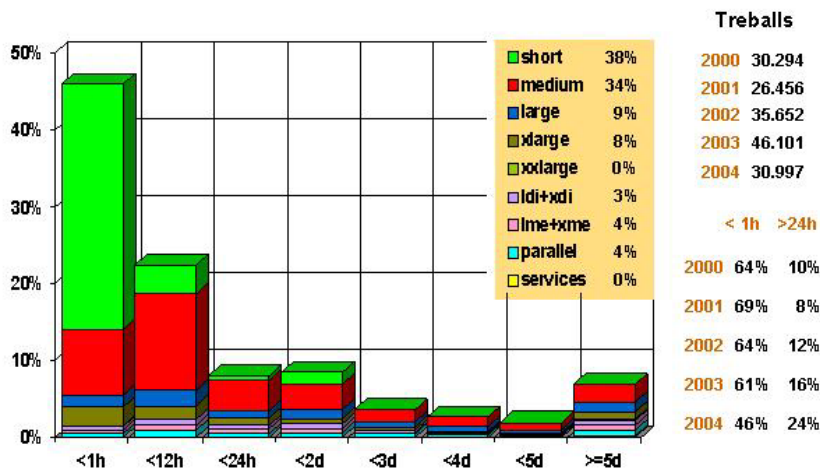


Figura 11. El temps d'espera per cua

El maquinari més utilitzat ha estat l'HP V2500 (92%) i N4000 (90%), l'HPC320 (90%), Beowulf (89%), GS1280 (75%) i rx2600 (71%). En el cas del GS1280 cal tenir en compte que un 75% de la màquina està dedicada a treballs paral·lels. La mitjana de la càrrega del maquinari és molt elevada (85%), sense tenir en compte l'IBM SP2 ja que els seus processadors no són competitiu avui dia.

En mitjana, el **temps d'espera** per cua en dies durant l'any 2004 ha estat d'1,3 dies mentre que l'any 2003 va ésser de 0,9 dies (figura 12). S'observa que el temps d'espera ha estat molt superior per aquells treballs que necessiten gran quantitat de recursos (cua *xxlarge* i *services*). En particular un treball del Dr. Santiago Olivella que requeria 16 GB de memòria i molta CPU va haver d'esperar 240 dies.

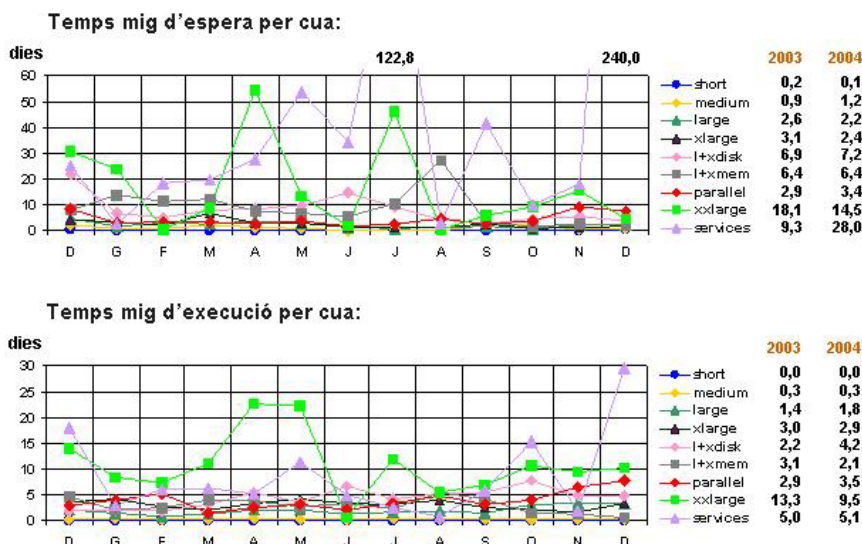


Figura 12. El temps d'espera mensual

Pel que fa al **temps d'execució**, en mitjana també ha estat lleugerament més alt que l'any passat tot i que la limitació de recursos disponibles ha fet que els usuaris autolimitessin els treballs més llargs.

S'han rebut 807 **consultes** (figura 13), de les quals un 77% s'han resolt al moment. Els usuaris han preguntat especialment sobre codis (28%), aplicacions (28%), gestors de cues (13%), sistemes operatius (8%), xarxa i comunicacions (6%) i informació general (5%).

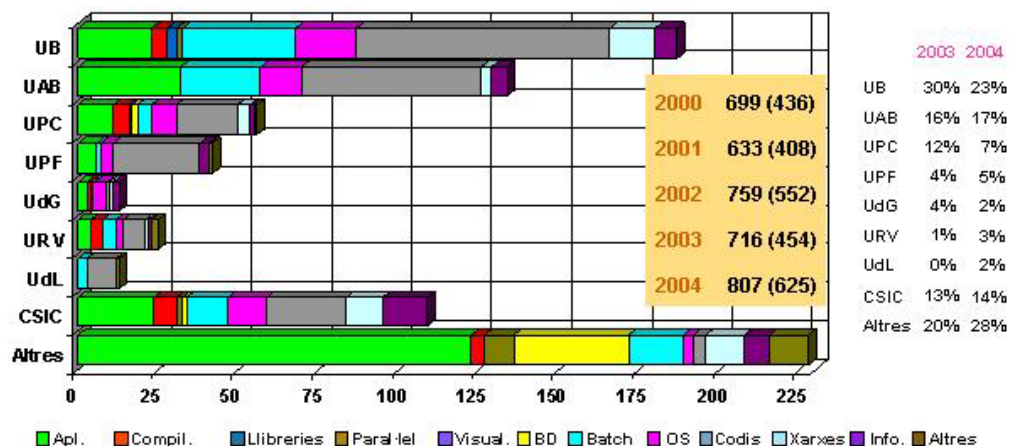
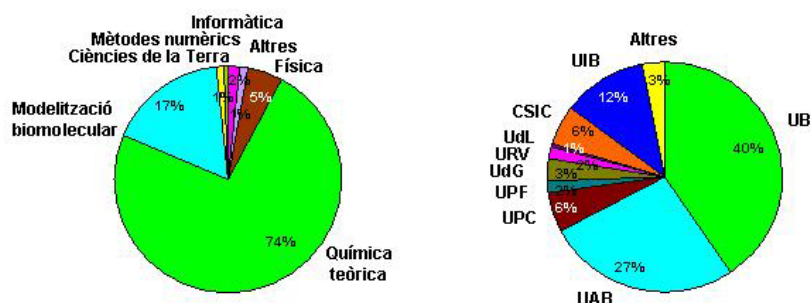


Figura 13. Les consultes del Dept. d'Assistència Tècnica

De les hores computacionals usades en el **període 1996-2004** (figura 14), un 74% ha estat en l'àrea de química teòrica, un 17% en la de modelització biomolecular, un 5% en la de física, i un 4% en altres àrees. Dues universitats han usat dos terços dels recursos: UB (40%) i UAB (27%).



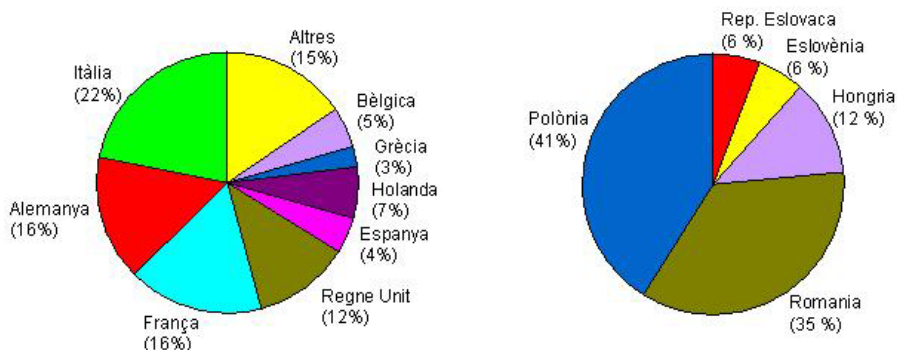
Els projectes de més consum:

- S. Álvarez (UB): *Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics* 10,8%
- M. Sodupe (UAB): *Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en...* 8,5%
- M. Orozco (UB): *Reconeixement molecular* 7,5%
- A. Lledós (UAB): *Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició* 7,3%
- F. Illas (UB): *Models ab initio en catàlisi heterogènia i ciència de materials* 6,7%
- J.M. Lluch (UAB): *Reaccions de transferència protònica i d'hidrogen* 6,6%
- F. Muñoz (UIB): *Reactivitat d'antibiòtics β i γ lactàmics* 6,4%
- J.M. Saá (UIB): *Estudi teòric del mecanisme de litiació de compostos hídrics...* 4,1%
- A. Aguilar (UB): *Dinàmica de reaccions químiques elementals* 3,6%
- J.J. Novoa (UB): *Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic* 2,8%

Figura 14. El consum en els anys 1996-2004

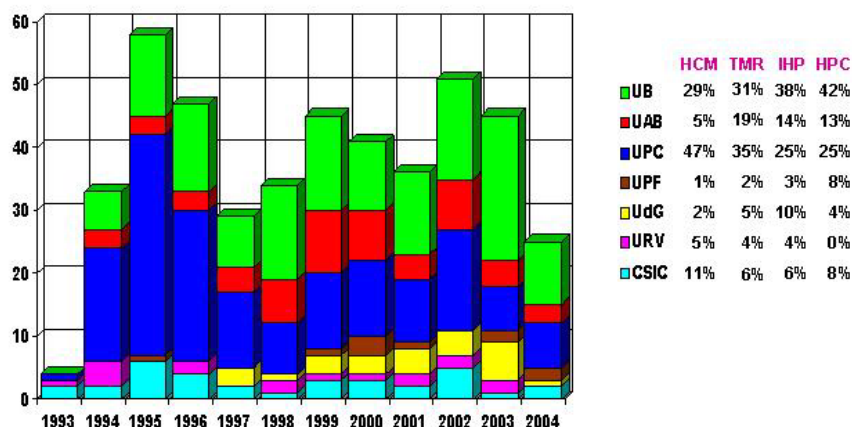
Els programes de mobilitat d'investigadors, impulsats i finançats per la Comissió Europea des de fa més de 10 anys, han permès que 333 científics d'arreu d'Europa hagin fet 448 estades a Catalunya per col·laborar amb diversos grups de recerca i usar els recursos del CESCA i del CEPBA (figures 15 a 20). El 2004 ha finalitzat l'Improving Human Potential (IHP), que des de l'inici del programa l'any 2000, ha permès a 129 investigadors realitzar un total de 162

estades a 37 grups de recerca catalans d'una durada mitjana de 6 setmanes. L'annex V inclou la llista detallada dels visitants d'enguany.



HCM-TMR-IHP-HPC: 431 visites PECO: 17 visites

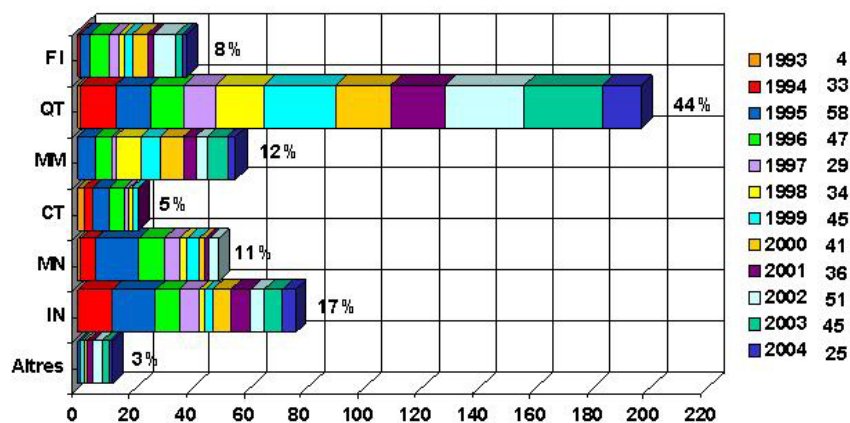
Figura 15. Programes de mobilitat: visites per país d'origen



Visites: HCM: 112 TMR: 133 IHP: 162 HPC: 24 PECO: 17

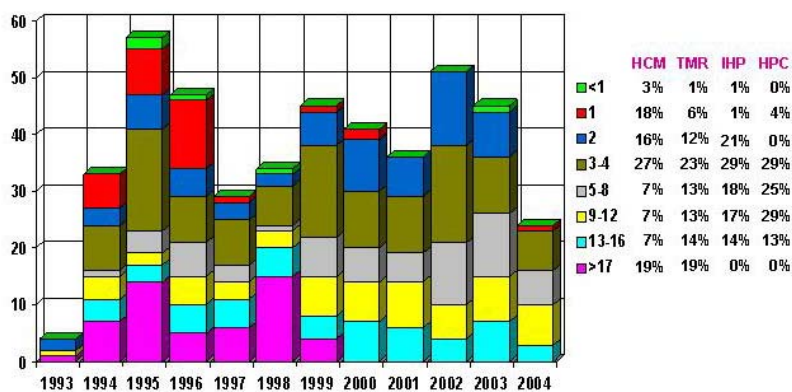
Figura 16. Programes de mobilitat: visites per institució

El 2004, 25 investigadors han participat en els programes de mobilitat. Amb l'IHP, 1, i 24 amb el nou programa, HPC-Europa Transnational Access, que ha començat el gener de 2004. Els 24 investigadors han realitzat 24 estades a 18 grups de recerca de Catalunya d'una durada mitjana de 8 setmanes. El nou programa de mobilitat s'inclou dins el projecte HPC-Europa (Pan-European Research Infrastructure on High Performance Computing) i finalitzarà el 2007. HPC-Europa és un consorci integrat per sis centres de supercomputació (CEPBA-CESCA, CINECA, EPCC, HLRS, IDRIS i SARA) i cinc centres de recerca en eines i tècniques de supercomputació (PSNC, PARALLAB, CASPUR, TCD i NTUA). El projecte inclou tres àrees d'activitat: Networking Activities, Research Activities i Transnational Access, que facilita la mobilitat d'investigadors. A diferència dels programes anteriors, se centralitzen les peticions d'estada als diferents centres a través d'un web (www.hpc-europa.org). Trimestralment es fa una convocatòria de sol·licituds i les estades han de tenir una durada de com a mínim dues setmanes i com a màxim tres mesos.



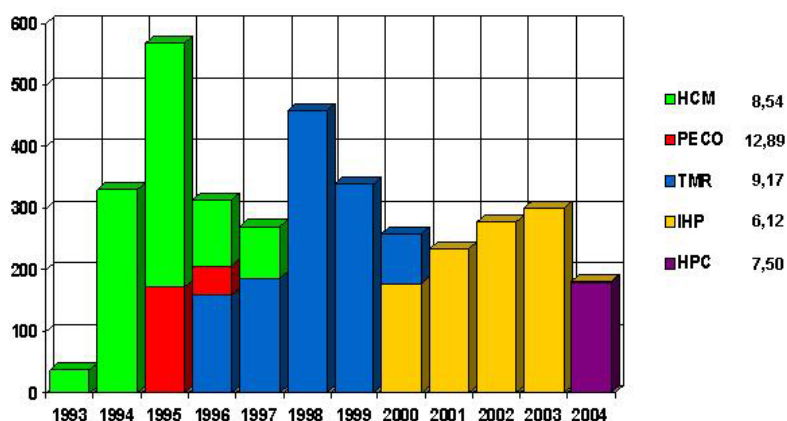
Visites: HCM: 112 TMR: 133 IHP: 162 HPC: 24 PECO: 17

Figura 17. Programes de mobilitat: visites per àrea de coneixement



Visites: HCM: 112 TMR: 133 IHP: 162 HPC: 24 PECO: 17

Figura 18. Programes de mobilitat: per durada de l'estada



Total set.: HCM: 957 TMR: 1.220 IHP: 991 HPC: 180 PECO: 219

Figura 19. Programes de mobilitat: durada total de les estades

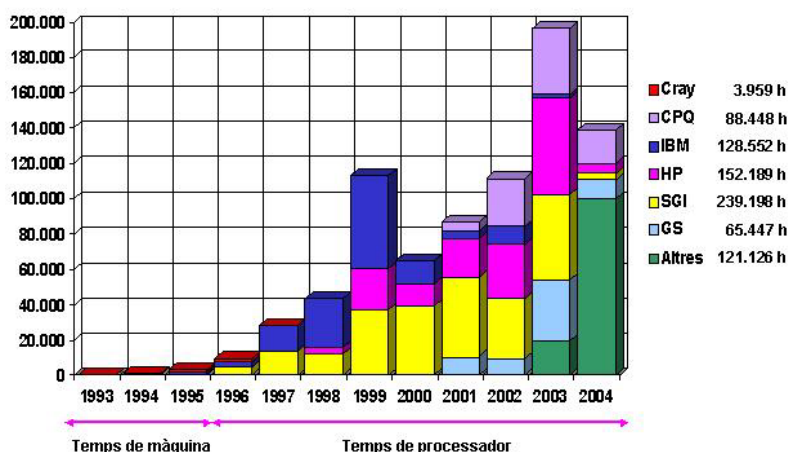


Figura 20. Programes de mobilitat: consum realitzat

3.4. Tesis Doctorals en Xarxa

El servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) comptava a la fi de l'any amb 2.142 tesis a la seva base de dades (figura 21), de les quals 804 han estat introduïdes el 2004. S'ha incorporat a aquest servei la Universitat Ramon Llull, que va signar el conveni l'octubre de 2004.

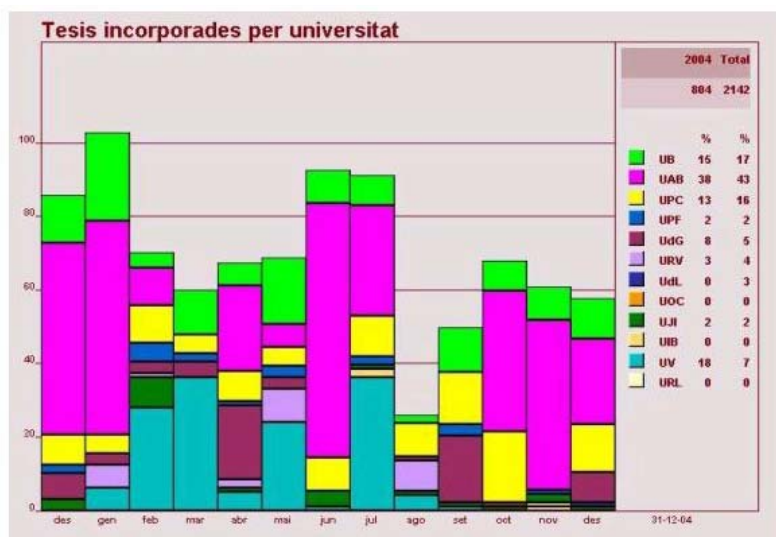


Figura 21. Tesis doctorals al servidor

Després d'un gran esforç per animar les universitats a participar en aquest projecte, l'any 2004 el CESCA i el CBUC han treballat conjuntament per incrementar el nombre de consultes a aquest servei. Així, mentre que al començament del 2003 aquest portal rebia unes 5.000 consultes mensuals, el 2004 ha rebut en mitjana 99.000 consultes mensuals provinents d'arreu del món. El novembre, amb més de 166.000, va ser el mes que el TDX va rebre més consultes, mentre que l'agost va ser el de menys consultes (figura 22).

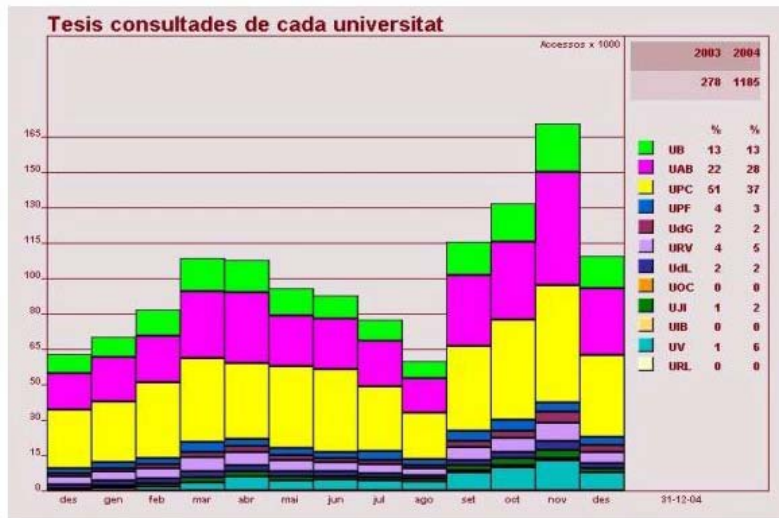


Figura 22. Tesis consultades

Les 804 tesis incorporades el 2004 s'han introduït classificades en 1.089 matèries, majoritàriament en ciències pures i naturals (34%), ciències aplicades (32%) i ciències socials (16%). Per a les 639 tesis incorporades a Catalunya, aquests percentatges són ciències pures i naturals i ciències aplicades (ambdues 28%) i ciències socials (11%). Les 30 tesis més consultades s'han introduït classificades en 45 matèries, majoritàriament en ciències aplicades (38%), ciències socials (22%) i ciències pures i naturals (18%).

Si es comparen les tres gràfiques que mostren l'ús del servidor: tesis consultades, accessos a fitxers PDF i bytes transferits (figures 22, 24 i 25), es conclou que en mitjana l'any 2004 el lector va llegir 3,2 fitxers PDF i en mitjana en cada consulta s'ha accedit a 4,26 MB, la qual cosa demostra el bon ús d'aquest servei. En total, es van accedir a 4.979 GB d'informació, mentre que l'any 2003 van ser 387 GB.

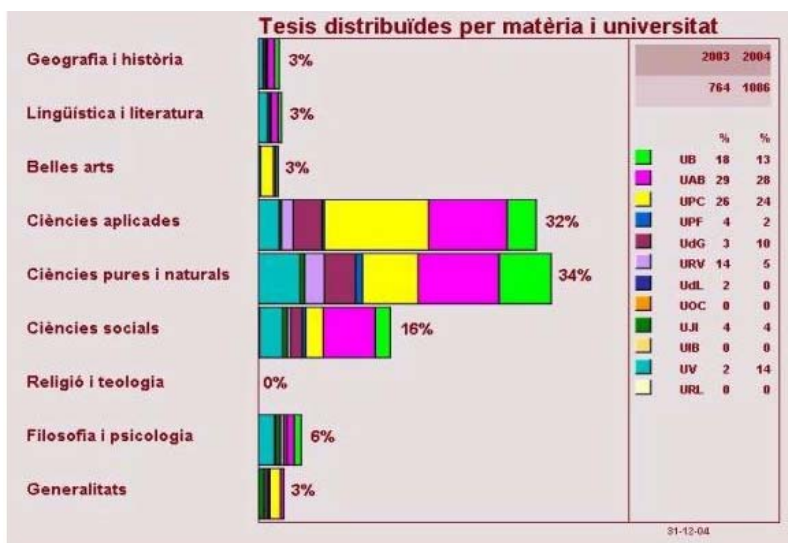


Figura 23. Distribució de tesis per matèria i universitat

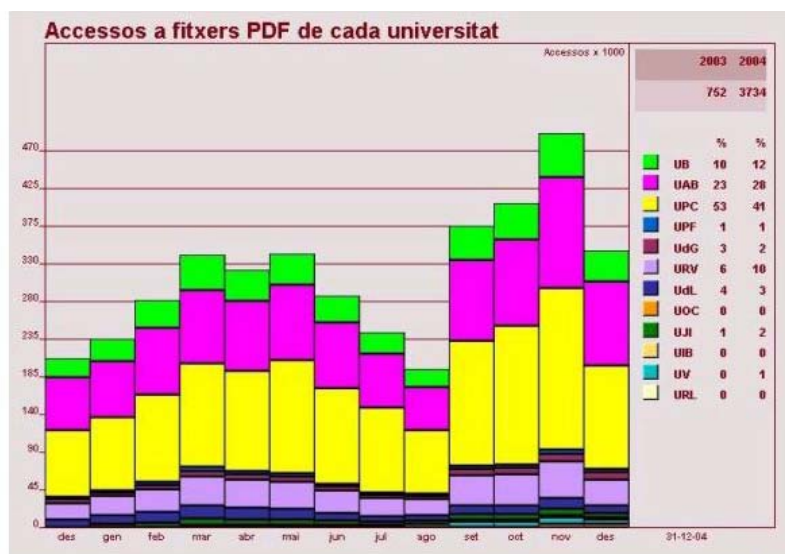


Figura 24. Nombre d'accessos a fitxers PDF

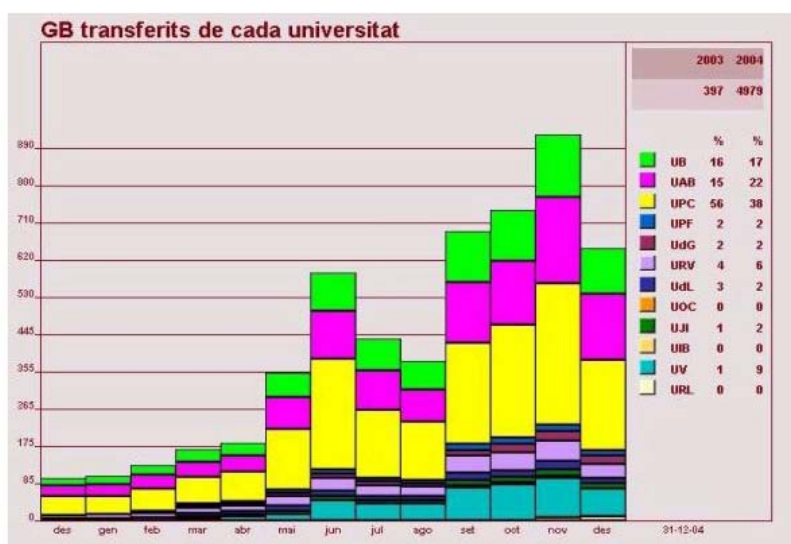


Figura 25. Bytes transferits

Pel que fa als accessos per dominis, el major nombre d'accessos són realitzats des de països de parla hispana, com ara Espanya (12%), Mèxic (11%) i Perú (7%) (figura 26). Com l'any 2003, el domini .net ha estat el que ha accedit més el TDX (20%); aquest domini està dedicat a empreses que ofereixen serveis basats en la xarxa tant proveïdors d'Internet com portals. Els proveïdors que més han accedit des del domini .net són Telefónica, Menta i Auna, els quals tenen una gran presència tant a Catalunya com a la resta de l'Estat.

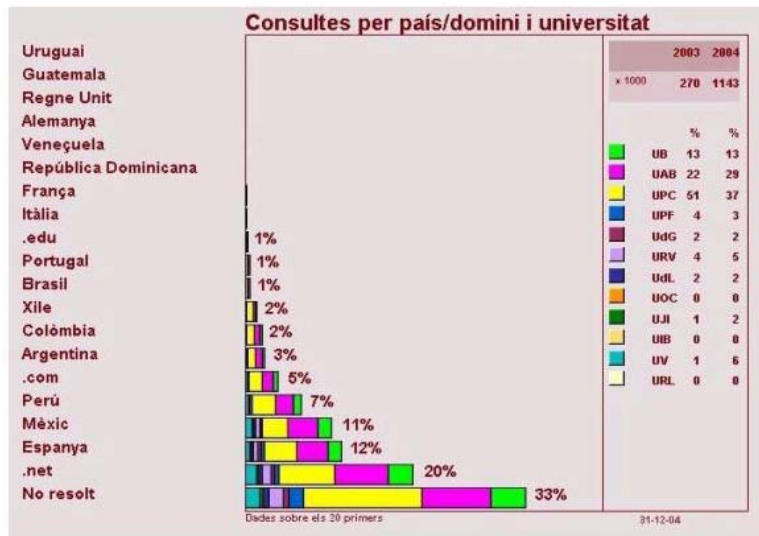
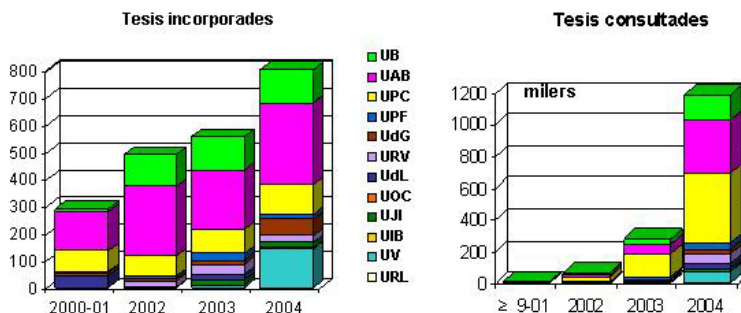


Figura 26. Consultes per país/domini i universitat

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 2004. També s'inclouen algunes curiositats, com ara que a diferència dels anys anteriors, per primera vegada, la tesi més consultada no ha estat tècnica sinó humanista i ha esdevingut també la tesi més consultada en el rànquing acumulat. Es tracta de *Teorías de la comunicació grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*, del Dr. Gerardo Javier Macías, dirigida pel Dr. Mario Herreros del Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB i llegida al febrer de 2003 (figura 27).



Les tesis més consultades 2001-04:

1. G. J. Macías Cortés / M. Herreros	Comunicació Audiovisual i Publicitat (UAB)	5,2%
2. E. Gutiérrez González / J.A. Álvarez Florez	Màquines i Motors Tèrmics (UPC)	4,7%
3. J.R. González Castro / R. Carreras Planells	Màquines i Motors Tèrmics (UPC)	4,7%
4. L. Massagués Vidal / R. Bosch Tous	Enginyeria Elèctrica (UPC)	4,3%
5. D. Sabillón Rodríguez / L.V. Cremades Oliver	Enginyeria Química (UPC)	3,7%

Figura 27. Evolució del TDX

El Departament d'Enginyeria Elèctrica de la UPC, amb 15 tesis incorporades al TDX, ha repetit l'èxit dels dos últims anys en tenir el major nombre de tesis consultades entre les 30 primeres: quatre l'any 2004, cinc l'any 2003 i quatre l'any 2002. Les quatre del 2004 també figuren entre les 20 primeres del rànquing acumulat.

La tesi número 2.000 va ser introduïda al TDX per la UAB el 25 d'octubre. La tesi, del Dr. Enric Pardo, porta el títol de *Geometry Effects on the Electromagnetic Properties of Linear Magnetic Materials and Superconductors in the Critical State* i ha estat dirigida pel professor Àlvar Sánchez, del Grup d'Electromagnetisme del Departament de Física de la UAB, conjuntament amb el Dr. Du-Xing Chen, professor d'ICREA al mateix departament. Sánchez i Chen destaquen la vàlua de serveis com el TDX. "En el nostre cas, durant la tesi de l'Enric Pardo hem treballat conjuntament amb investigadors de diversos països europeus, Estats Units i Xina, per la qual cosa eines com aquesta són importants".

3.5. Altres serveis

Per al **Servei de Cerca de Farmacòfors** (SCF), s'ha adquirit un servidor HP Proliant amb dos processadors Xeon a 3,2 GHz, 4 GB de memòria principal, 73 GB en disc i sistema operatiu Linux Red Hat Workstation Server 3.0. El nou sistema substituirà l'SGI Octane, que des del 1996, quan va començar l'SCF, ha allotjat aquest servei.

S'han emmagatzemat 8,06 TB al **Servei d'Emmagatzematge de Dades** (SED), un 72% per les còpies de seguretat pròpies i un 28% per arxiu permanent de dades d'usuari.

Dins l'**Accés a Gestors d'Informació per Internet** (AGI²), s'han hostatjat al servidor HP rp5430 els webs i les bases de dades de l'Observatorio para la CiberSociedad, del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació per al projecte UNEIX, i el de la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat (figura 28). Per a alguns webs d'aquest servidor s'ha habilitat el programari lliure webalizer, una eina d'anàlisi de servidors que genera informació detallada sobre tots els moviments que es produeixen en un servidor web.

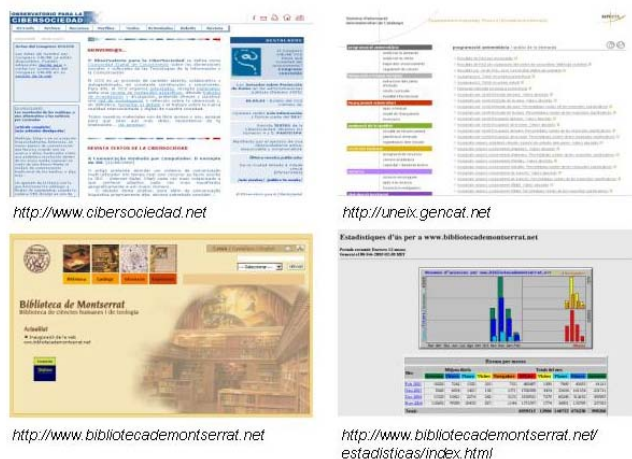


Figura 28. HP rp5430 - servidor de web

També s'ha continuat la gestió de la versió electrònica de la publicació *Contributions to Science* (www.cat-science.com). El 2004 s'han introduït el *Volume 2 Issue 3* del 2003.

El 2004 s'ha usat el **GaiaGrid** per generar simulacions realistes de telemetria per a un miler d'estrelles binàries astromètriques. La simulació va córrer en 23 nodes distribuïts en 6 instituts de 5 països. Es van utilitzar un total de 1.056 hores computacionals per les tasques, i es van produir i transferir automàticament un total de 16,5 GB de dades al repositori central del CESCA. La simulació només va trigar 4 dies a completar-se, incloent diverses aturades per analitzar els resultats parcials. Malgrat que la simulació podria haver estat duta a terme sense GaiaGrid, l'ús d'aquesta eina va simplificar i agilitar molt la feina, i ha permès avançar en la implementació de la tecnologia Grid per ésser executada en entorns reals de treball.

El disseny i implementació del sistema de base de dades de GAIA, GDAAS (Gaia Data Access and Analysis System), el porten a terme des del juliol de 2000 un equip d'investigadors de la Universitat de Barcelona i l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya, juntament amb l'empresa Grupo de Mecánica del Vuelo i el CESCA; el projecte forma part del Technological Research Programme de l'Agència Espacial Europea per al desenvolupament de les noves tecnologies necessàries per a les futures missions. Gràcies al GaiaGrid, la base de dades que es troba en el repositori central de 5 TB hostatjat al CESCA estarà accessible per als proveïdors d'algoritmes d'anàlisi de dades.

4. Les comunicacions

Per al món de la universitat i la recerca és imprescindible gaudir d'unes bones comunicacions. Per això, si bé en els seus inicis el CESCA va desplegar una xarxa d'altres prestacions amb la finalitat de permetre una bona accessibilitat dels usuaris als recursos de supercomputació, actualment aquesta juga un paper clau en l'accés a la informació i en el desenvolupament de nous projectes de la comunitat universitària que necessiten accés a Internet amb qualitat de servei i banda ampla.

Durant el 2004 ha continuat la gestió de l'Anella Científica i del Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX), l'al·lotjament del nus de RedIRIS a Catalunya i l'administració de tota la infraestructura bàsica del Centre, com són servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, màquines allotjades, etc.

Després de la renovació tecnològica de l'Anella Científica duta a terme el maig del 2003, el 2004 s'ha actualitzat l'equip central de l'Anella Científica i encaminador al CATNIX, un Cisco Catalyst 6513 (figura 29). S'hi han substituït les targetes processadores SUP2/MSFC2 per les SUP720 BXL i la targeta de 16 ports gigabit per una de 24 ports. A més, se n'ha millorat la seguretat amb la renovació de l'eina de detecció d'intrusions.

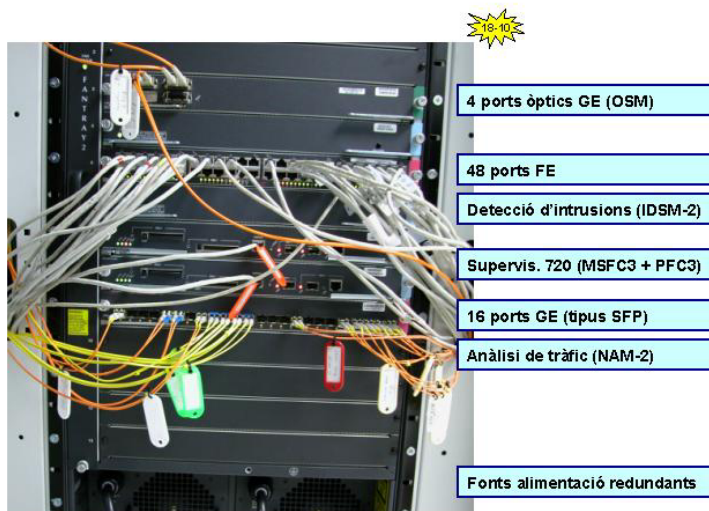


Figura 29. El commutador de l'Anella: Catalyst 6513

Aquestes actualitzacions han fet que l'Anella tingui més funcionalitats, com ara increment de l'escalabilitat per ampliar les connexions cap a RedIRIS i el troncal de l'Anella, més capacitat per a la taula d'encaminament, possibilitat d'implementar més llistes d'accés per temes de seguretat, IPv6 natiu, MPLS (Multiprotocol Label Switching) natiu per maquinari i millores en la qualitat de servei.

A més, el CESCA disposa d'un rang d'adreces IP propi per a les institucions de l'Anella Científica. Fins ara, era la xarxa estatal de recerca, RedIRIS, qui proporcionava al CESCA i a les institucions connectades a l'Anella aquestes adreces que són assignades i registrades per RIPE NCC a Europa. Però, un cop finalitzats una sèrie de procediments i actuacions, el CESCA és qui proveeix les institucions d'adreces IP.

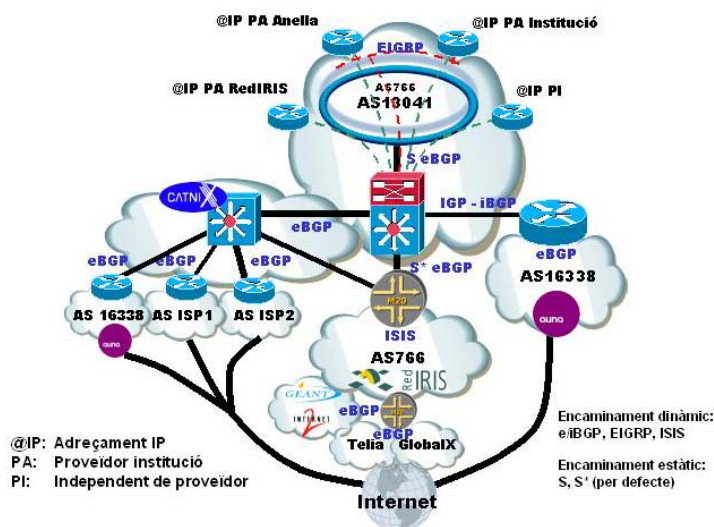


Figura 30. Sistema autònom de l'Anella Científica

Disposar d'adreces IP pròpies facilita l'agrupament de les adreces en un sistema autònom propi (figura 30). També possibilita enrutament dinàmic, la qual cosa permet llibertat d'elecció de proveïdor i la sortida per més d'un proveïdor simultàniament. A més, també ha possibilitat l'agrupació al CATNIX de les adreces de l'Anella amb independència de les de RedIRIS, així com ha aportat millores en la gestió.

4.1. L'Anella Científica

L'Anella ha permès el 2004 que les institucions connectades poguessin participar en projectes o usar l'amplada de banda disponible per a noves experiències. Alguns exemples dels usos de la xarxa són els següents:

- La Corporació Sanitària Parc Taulí ha participat en el Projecte Xarxa de Radiologia Digital, en col·laboració amb l'Hospital General de Vic i el CatSalut, entre d'altres, i en el projecte DEAR-MAMA (detecció de primers senyals en mamografia), en col·laboració amb l'IFAE i el CSIC, entre d'altres.
- El Port d'Informació Científica, de la UAB, coordina la Federació Sud-oest d'Europa al projecte Enabling Grids for E-Science in Europe, i el projecte de desenvolupament de processament de dades per als centres estatals que participen en els experiments del Large Hadron Collider del CERN.
- La UdG ha desplegat una xarxa sense fils amb uns 80 punts d'accés i usa la telefonia IP amb 20 terminals integrats plenament amb la telefonia tradicional.
- El CSIC ha creat un *grid* entre les màquines del Centre d'Investigació i Desenvolupament, el Parc Científic i l'Institut Jaume Almera. El 2004 han estat 30 màquines i tenen previst connectar-ne més.

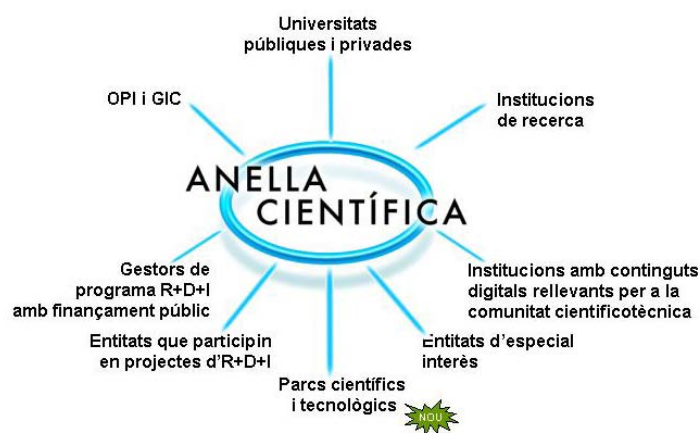


Figura 31. Política d'adhesió

El 2004 s'ha revisat la política d'adhesió a l'Anella Científica, d'una banda, per autoritzar la incorporació de parcs científics i tecnològics i, de l'altra, per crear la figura dels centres vincu-

lats a les institucions ja adherides per tal que aquestes puguin disposar del seu propi punt d'accés directe a l'Anella o el seu propi adreçament IP.

Aquests canvis en la política de connexió permetran que els parcs científics i tecnològics puguin connectar-se a l'Anella Científica (figura 31), tot i que per al tràfic de fora de l'Anella i el CATNIX usaran la sortida pròpia del CESCA, independent de RedIRIS, perquè la seva política d'afiliació no els permet connectar-se a la xarxa estatal.

Després de la renovació tecnològica duta a terme l'any 2003, l'Anella Científica amb tecnologia Gigabit Ethernet ha incrementat considerablement tant el nombre d'institucions com el de punts d'accés. Així, el nombre d'institucions connectades s'ha incrementat de 43 a 49 amb la incorporació de la Universitat Internacional de Catalunya, l'Institut Català d'Investigació Química i la Fundació Puigvert, a 10 Mbps, el Museu de Vilafranca-Museu del Vi i el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya, a 4 Mbps per ADSL, i el Barcelona Supercomputing Center, a 1 Gbps amb una connexió local (figura 32). A més, el 2004 s'ha adherit la Fundació Gran Teatre del Liceu, que es connectarà a 100 Mbps, i resta pendent de connectar el Parc Astronòmic del Montsec, adherit a la fi del 2003.

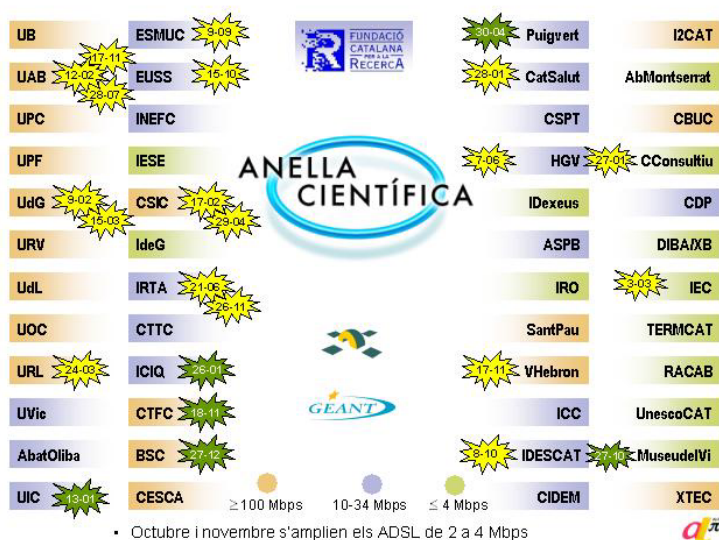


Figura 32. Institucions connectades

Els punts d'accés connectats directament a l'Anella s'han incrementat en 17. Dos corresponen a noves institucions (Museu del Vi i Puigvert) i tres són d'institucions pendents de connexió de l'any 2003 (Centre Tecnològic Forestal de Catalunya, Institut Català d'Investigació Química i Universitat Internacional de Catalunya). Els 12 restants són: un a 16 Mbps (de l'Hospital General de Vic), sis a 10 Mbps (Universitat Ramon Llull-Escola Universitària de Turisme Sant Ignasi, Servei Català de la Salut, Escola Universitària Salesiana de Sarrià, Institut d'Estadística de Catalunya i dos de l'Institut d'Estudis Catalans) i cinc amb tecnologia ADSL (dos de la Universitat de Girona, dos de l'Institut de Recerca en Tecnologies Agroalimentàries, i un del Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya). En total el nombre de punts és de 53, un cop comptabilitzada la baixa de la unitat docent de la UAB.

S'han produït increments de cabal en diversos punts d'accés: la UAB de 200 Mbps a 500 Mbps passant a una connexió física d'un gigabit, la Fundació Institut d'Investigació Germans Trias i Pujol de 2 Mbps a 10 Mbps i l'Escola Superior de Música de Catalunya d'una connexió amb ADSL de 2 Mbps a una de 10 Mbps amb Giganet. Cal destacar que l'Institut Jaume Almera del CSIC ha millorat les seves connexions passant de 10 a 100 Mbps en la connexió local cap al CESCA i que la Delegació està compartint el punt d'accés de la seu de l'Institut d'Estudis Catalans que disposa de 20 Mbps, 10 per cada institució. També al punt d'accés de l'Hospital Vall d'Hebron, la unitat docent de la UAB està usant 10 Mbps dels 100 Mbps després d'haver donat de baixa la connexió que usava de 2 Mbps Frame Relay.

Des de la fi de novembre tots els centres i institucions connectats a l'Anella Científica a través d'una línia ADSL han vist duplicada la seva velocitat, que ara és de 4 Mbps de baixada i 512 Kbps de pujada. Les connexions per a noves seus es demanen directament a aquestes velocitats. Els centres que han millorat la seva velocitat són el Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya, l'Escola de Turisme de la UdG, la Fundació Universitat de Girona: Innovació i Formació, l'Estació Experimental Fundació Mas Badia de l'IRTA, el Centre d'Aqüicultura de l'IRTA, el Museu de Vilafranca-Museu del Vi, i el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya.

A més, la Universitat de Lleida que disposava d'un enllaç Ethernet a l'Anella, s'ha connectat el 2004 a través d'un enllaç a la xarxa Giganet d'Al-Pi Telecomunicacions. Així, disposa de més fiabilitat gràcies als camins diferents pels quals transcorre la fibra. També la UdG i la URV disposen des de l'abril de *dual-boming* amb fibres per camins diferents.

Amb aquestes incorporacions i modificacions, el nombre d'institucions connectades amb banda ampla (≥ 34 Mbps) ha passat de 17 el 2003, a 20. El nombre total de punts d'accés directes a l'Anella han passat de 37 a 53, i la seva capacitat agregada de 2.653 Mbps a 3.111 Mbps (figures 33 i 34).

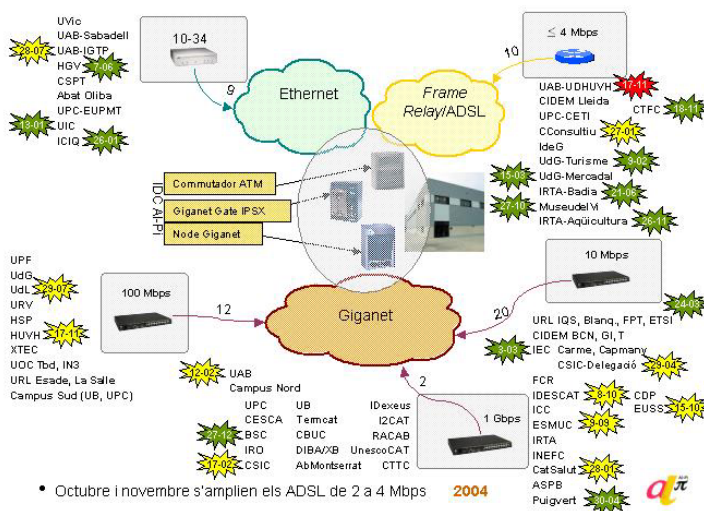


Figura 33. Punts d'accés de l'Anella Científica

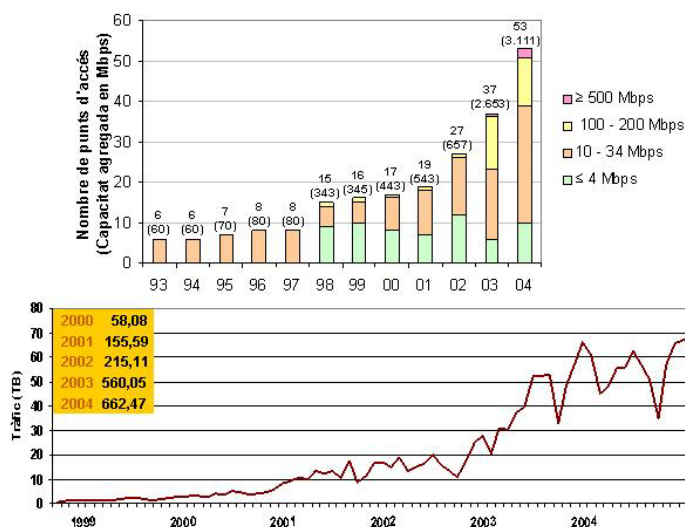


Figura 34. L'evolució de l'Anella Científica

A diferència dels anys anteriors en els quals el tràfic es duplicava o fins i tot es triplicava,enguany ha tingut un increment de només un 18%. És possible que aquest fet denoti una estabilitat en el creixement vegetatiu per a les activitats habituals, i que el futur creixement serà a conseqüència de nous projectes amb gran necessitat d'amplada de banda (figura 35).

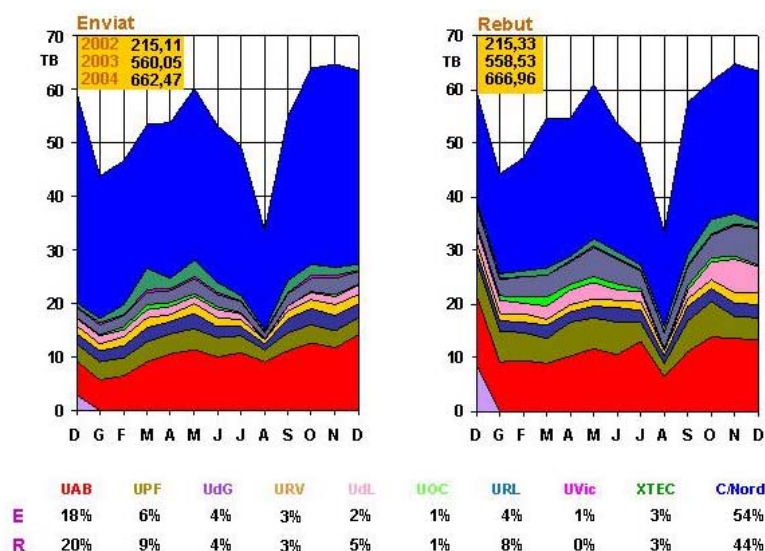


Figura 35. El tràfic per punt d'accés

4.2. Els Serveis Addicionals

Els serveis de secundari del domini .es (DNS), *proxy-cache*, *news*, *ftp-mirror* i el d'accés remot, així com el servidor de correu propi han estat migrats a set nous servidors, cinc Xeon duals i dos amb processador Pentium 4. La majoria dels Serveis Addicionals i el d'hostatge es trobaven a

màquines Sun adquirides abans de l'any 2000. El maquinari adquirit, que usa programari lliure, disposa de més espai en disc i més memòria, i proporciona més velocitat en el funcionament dels serveis.

Amb la migració, s'ha aprofitat també per actualitzar programari i diferenciar els serveis per VLAN, la qual cosa permet millorar-ne la gestió i la seguretat. Aquesta diferenciació per VLAN ha possibilitat filtrar l'accés a la màquina només a través dels ports necessaris per al funcionament del servei, la qual cosa en millora la seguretat. Els nous servidors han reduït el cost d'instal·lació i de manteniment i han permès optimitzar també l'ús de l'espai gràcies a la seva instal·lació en un bastidor amb guies (*rack*). En aquest bastidor s'ha instal·lat també un nou commutador on es connecten aquests servidors.

El Servei de Seguretat Informàtica (**SEG**) ha continuat durant el 2004 donant suport a les diferents institucions mitjançant serveis proactius, reactius i de valor afegit, i ha donat resposta 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 mitjançant clients P2P, correu brossa, frau basat en 'pesca', etc. (figura 36). També s'han portat 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.

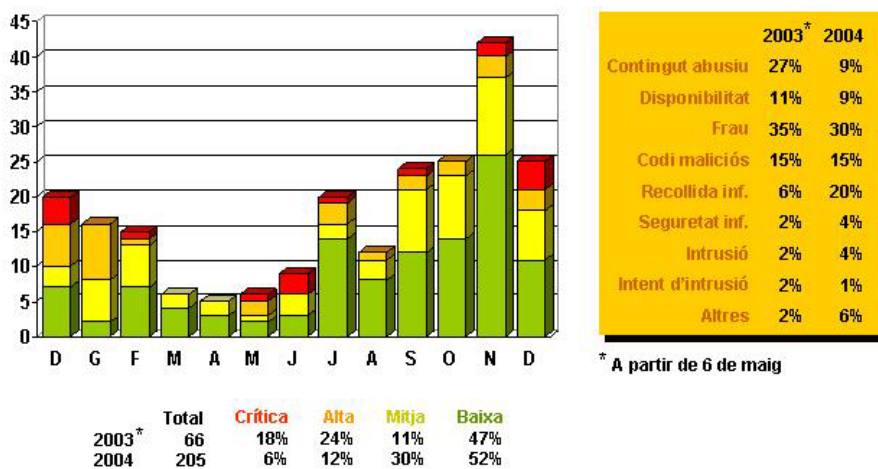


Figura 36. Incidents de seguretat

Respecte l'any 2003, ha crescut el nombre d'incidències registrades, tot i que cal tenir en compte que se'n té constància des del maig de 2003 quan va ser posat en marxa el servei. Aquest augment en el nombre d'incidències registrats també és conseqüència, d'una banda, de la instal·lació d'una eina de gestió d'incidències de seguretat (GIS) que consisteix en una base de dades d'incidències, basada en programari lliure, que permet un tractament automatitzat de la informació. D'altra banda, el fet de disposar d'adreces IP pròpies i la regularització del sistema autònom ha fet que el CESCA rebi notificació d'incidències que abans no li eren comunicades. Malgrat que el nombre d'incidències és superior, és important que precisament el percentatge d'incidències de caràcter crític i alt s'ha reduït a la meitat, mentre que les que han augmentat

són de tipus mitjà i baix. Cal destacar l'aparició dels incidents de tipus 'pesca' amb l'objectiu d'enganyar l'usuari per robar els seus codis bancaris o de pagament en línia.

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 d'utilitat per al personal d'operació de les diferents institucions i el propi CESCA com a gestor de l'Anella.

Per al Servei de Certificació Digital (SCD), el 2004 s'ha signat un conveni amb l'Agència Catalana de Certificació (CATCert) per constituir el CESCA com una Entitat de Registre Col·laboradora de l'Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca (EC-UR) i detallar la política i els procediments d'aquesta. S'ha incorporat l'IRTA com a entitat usuària i s'han lliurat els primers certificats digitals. També s'ha finalitzat la versió definitiva de l'addenda dels convenis signats amb les universitats i institucions, que ha estat distribuïda a totes les institucions adherides, s'ha desenvolupat una nova secció al web (*www.cesca.es/scd*) per facilitar l'ús del servei, i s'han emès els primers certificats de personal i el primer de servidor per a Intercampus.

Els objectius d'ús dels certificats són l'enviament de correus electrònics signats, el xifratge de documents, la signatura d'actes acadèmiques d'Intercampus, entre altres. Per a aquest servei es va signar el 2003 el conveni marc de col·laboració amb l'Administració i les universitats i es va crear l'Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca. El model de jerarquia de les entitats de certificació digital es mostra a la figura 37.

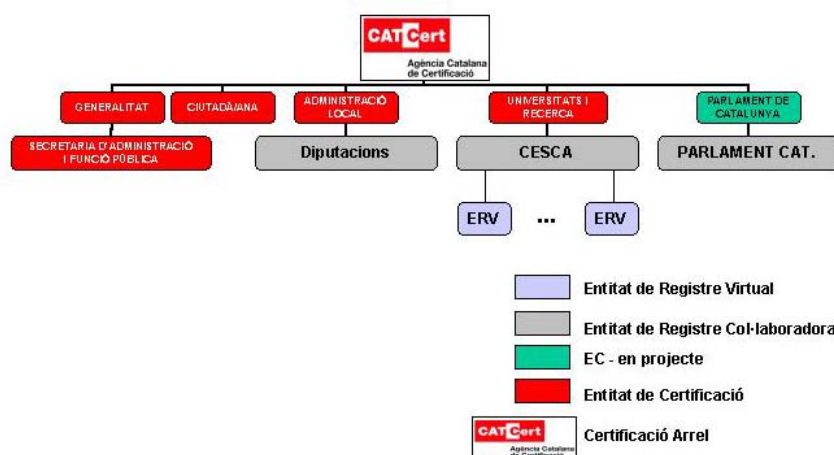


Figura 37. El model de jerarquia del Servei de Certificació Digital

El CESCA ha rebut un ajut del Ministerio de Industria, Comercio y Turismo per fer una prova pilot i crear entitats de registre internes a les universitats, així com impulsar el desenvolupament d'aplicacions que facin ús de la certificació digital. El CESCA participa en el projecte TUNA: Tarjeta Universitaria con Nuevas Aplicaciones de firma digital en dispositivos fijos y móviles, conjuntament amb Acotec, Caixa Catalunya, Sermepa, UPC i UPF.

El servei de Veu per Internet a l'Anella (VIA) permet aprofitar la infraestructura de l'Anella Científica per cursar les trucades interprovincials cap a Barcelona amb cost de trucada metropolitana o provincial. La UdG usa aquest servei des del 2003.

El servei de *multicast*, nascut arran de la plataforma de proves MBone, permet optimitzar l'ús de l'amplada de banda en aplicacions multimèdia com ara els projectes Òpera Oberta i Opera Learning, inclosos en el programa "Digital Òpera. El Liceu a la Universitat". Òpera Oberta es configura com un curs universitari d'introducció a l'òpera, en què mitjançant l'assistència a cinc òperes de la temporada del Liceu, una classe prèvia d'introducció a cada òpera i un portal a Internet amb materials complementaris, els alumnes matriculats tenen una primera experiència operística. La particularitat d'aquest projecte és que les òperes es retransmeten en directe des del Liceu per Internet amb una qualitat d'àudio (Dolby Digital 5.1) i vídeo (MPEG-2 de 8 Mbps), que permeten que els alumnes assisteixin a les òperes a les sales d'actes de les seves universitats. El 2004, el tercer any d'Òpera Oberta, 37 universitats de l'Estat espanyol, tres mexicanes, una a Portugal, una a França i la Universitat d'Andorra, per un total de quasi 60 campus, han participat al projecte. A Catalunya, hi han assistit més de 1.300 alumnes (figura 38).

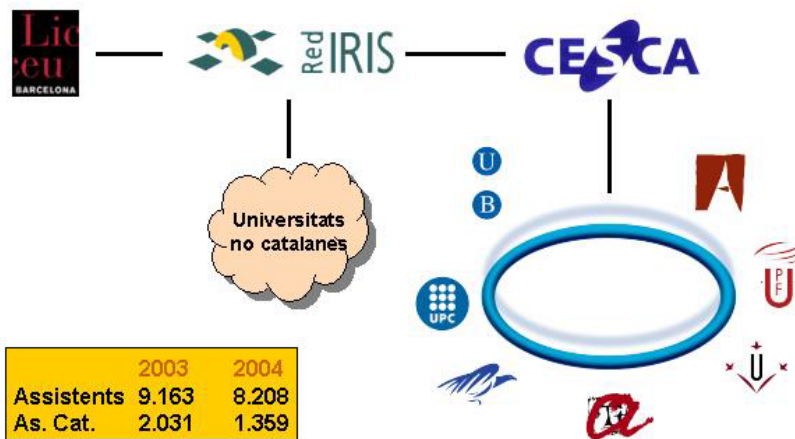


Figura 38. El projecte Òpera Oberta

El projecte Opera Learning tracta d'aprofundir en tots aquells aspectes rellevants que envolten un títol operístic, mitjançant sis seminaris que culminen amb l'assistència dels alumnes a l'assaig general d'aquella òpera. En aquest cas, la tecnologia de videoconferència d'alta qualitat per Internet permet l'ús de materials audiovisuals d'exemple i mantenir una interacció amb els alumnes que pertanyen només a universitats de l'àmbit de la llengua catalana.

El servei de *multicast* també ha estat usat per transmetre a les universitats de Catalunya, a través de l'Anella Científica, els diàlegs i alguns esdeveniments artístics del Fòrum de les Cultures. La retransmissió en directe del canal Diàlegs va representar 8 hores diàries durant 141 dies d'emissió cap a Internet en *multicast* amb qualitat i multilingüe.

Pel que fa a les *news*, el nombre de peticions al servidor s'ha reduït considerablement (un 78%) i es confirma la tendència dels últims anys. Aquesta disminució és conseqüència dels canvis en els hàbits d'ús de la xarxa (figura 39).

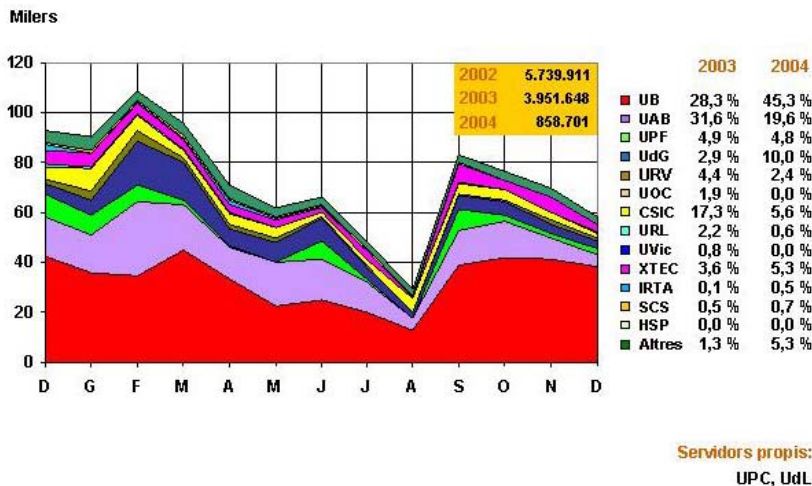


Figura 39. Els articles llegits per institució

L'Anella continua disposant d'una sortida pròpia a la Internet comercial, independent de Red-IRIS. Aquesta sortida complementa l'accés a Internet per a les institucions de l'Anella afiliades a RedIRIS i és usada per aquelles entitats connectades a l'Anella però sense afiliació a la xarxa de recerca estatal.

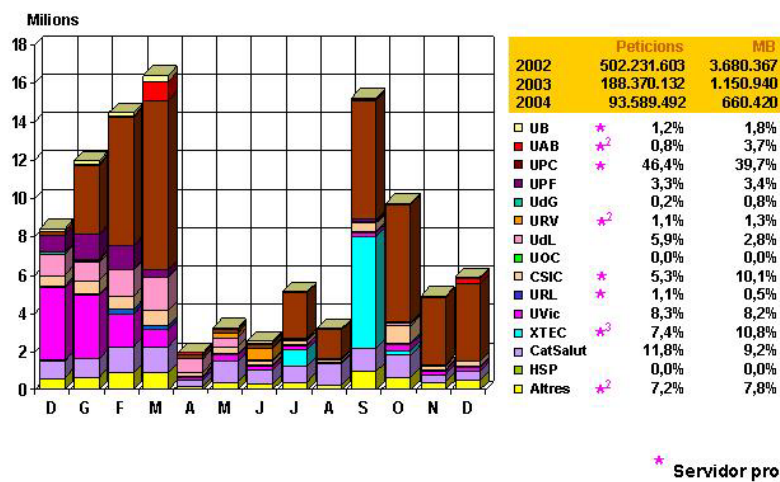


Figura 40. El servidor de *proxy-cache*: peticions per institució

Aquesta sortida pròpia a Internet també és utilitzada pel servidor *proxy-cache*, que optimitza els accessos via web. El fet que les línies no estiguin congestionades fa que els usuaris no vegin la necessitat d'usar aquest servei i, per tant, continua la tendència de disminució del nombre de peticions iniciada el 2002. Mentre que la reducció més considerable fou precisament entre el 2002 i el 2003, passant de 502,23 milions a 188,37 milions (una reducció del 63%), enguany s'ha reduït en un 50% (figura 40). De la mateixa manera, també la família del *proxy* del Centre s'ha reduït. El nombre de germans ha passat d'11 a 5 i el de fills, de 25 a 22 (figura 41).

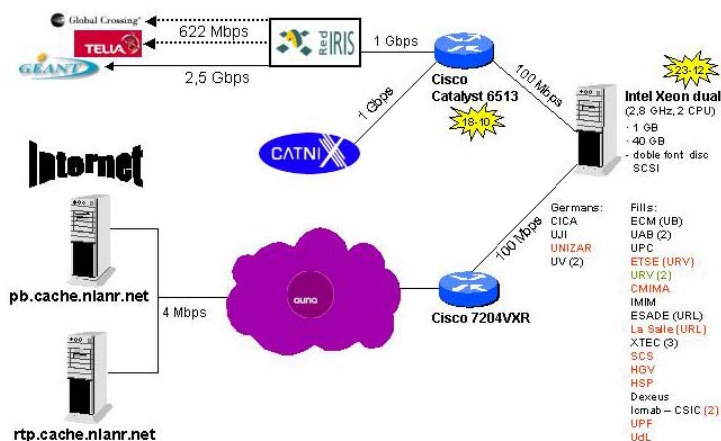


Figura 41. El servidor de *proxy-cache* i la seva família

Pel que fa al servidor d'*ftp-mirror* ha augmentat tant el nombre de fitxers descarregats, en un 11%, com la quantitat d'informació descarregada, en un 89% (figura 42).

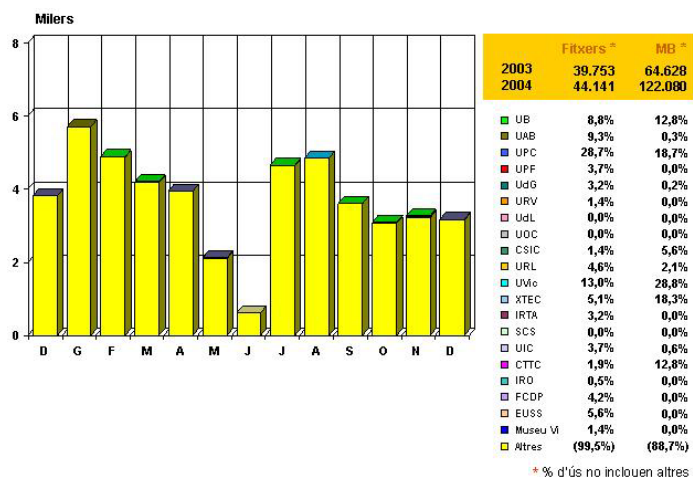


Figura 42. El servidor d'*ftp-mirror*. fitxers per institució

El Servei de Videoconferència (**SAV**) continua permetent la comunicació a través de videoconferència amb amplada de banda garantida i qualitat de servei entre el CIDEM i les seves seus.

Per al Servei d'Accés Remot (**SAR**) s'ha instal·lat un nou servidor d'autenticació RADIUS, de Radiator. Aquest nou programari aporta prestacions, com ara major nombre d'usuaris registrats, i redueix el cost econòmic. Aquest servei facilita el teletreball permetent a l'usuari disposar d'un entorn de treball idèntic tant si es connecta des del seu lloc de treball com des del seu domicili, i permet que l'usuari pugui usar els recursos de l'Anella Científica d'accés restringit, com ara la Biblioteca Digital del CBUC i els serveis de supercomputació del CESCA. El 2004, 3.408 usuaris de 13 institucions connectades a l'Anella han disposat d'un codi per accedir al SAR (figura 43). El 2004 s'ha incorporat a aquest servei la UB.

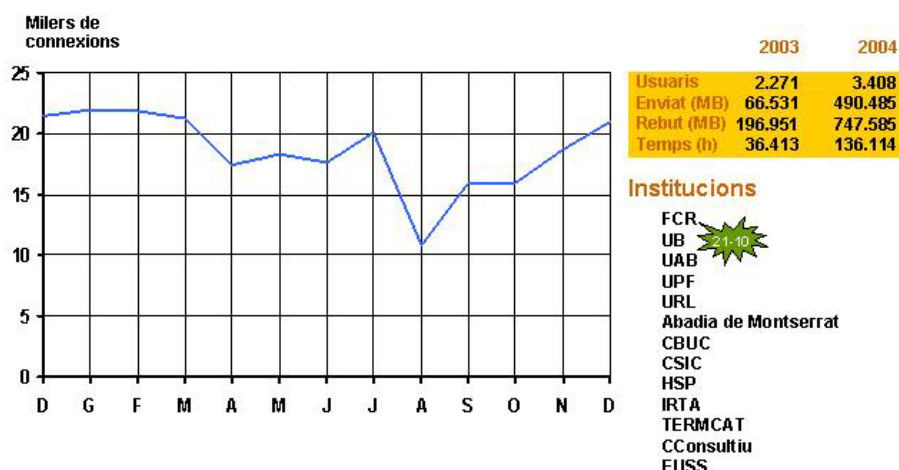


Figura 43. El Servei d'Accés Remot

4.3. La connectivitat de RedIRIS

Després de la renovació tecnològica de la xarxa estatal de recerca, RedIRIS, el 2003, enguany no s'ha produït cap canvi en les connexions ni en el troncal d'aquesta xarxa. Ara bé, a nivell organitzatiu, a l'inici de 2004 RedIRIS es va integrar com un departament en el si de l'entitat Red.es, adscrita primer al Ministerio de Ciencia y Tecnología i després de la reorganització, al Ministerio de Industria, Comercio y Turismo.

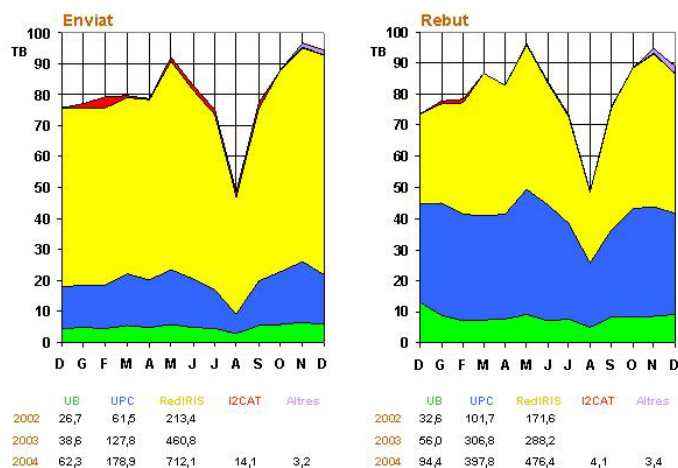


Figura 44. Estadístiques de les connexions locals

Pel que fa al tràfic, seguint la tendència del 2003, s'ha exportat més informació que la que s'ha rebut (figura 44), fenomen que s'atribueix al creixement de les aplicacions d'intercanvi de fitxers, els quals caldrà monitorar acuradament per evitar la saturació de les línies amb tràfic no estrictament científic.

Amb Europa, RedIRIS ha continuat connectada a 10 Gbps i els enllaços troncal de Géant entre Madrid i París i Madrid i Milà han continuat també a 10 Gbps (figura 45).

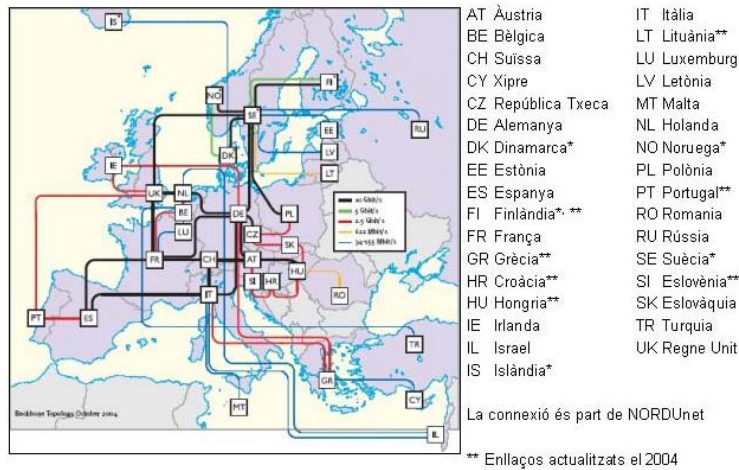
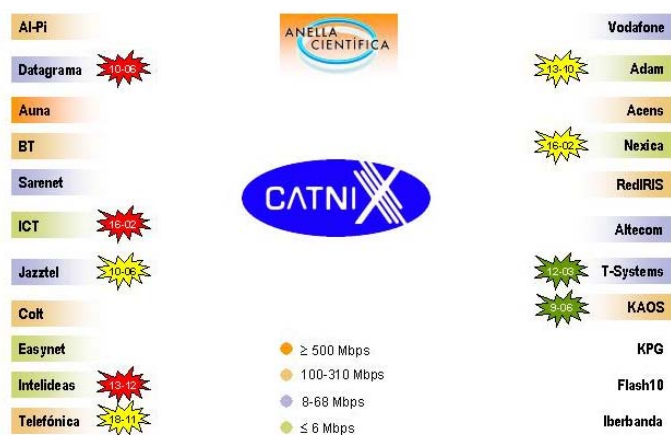


Figura 45. Géant, la xarxa d'investigació Gigabit paneuropea

4.4. El Punt Neutre d'Internet de Catalunya

A la fi del 2004 el **CATNIX** comptava amb 17 entitats connectades i tres més han signat el conveni d'incorporació (figura 46). S'hi ha incorporat T-Systems Eltec, a 35 Mbps, i Kaos Redes IP, a 100 Mbps, i estan pendents de connexió KPG (des del 2003), Flash10 i Iberbanda. D'altres companyies, han incrementat la velocitat de connexió al CATNIX: Adam (de 2 Mbps a 4 Mbps), Telefónica (de 155 Mbps a 310 Mbps), i Nexica (de 2 Mbps a 6 Mbps).



Catalyst 6506 operatiu des del 19-2-03

Figura 46. El Punt Neutre d'Internet a Catalunya

Han estat baixa al CATNIX els proveïdors d'Internet Datagrama, ICT i Intelideas. Les baixes de Datagrama i d'ICT s'han produït després que s'hagin integrat en els ISP Jazztel i Nexica,

respectivament. De tota manera, els seus sistemes autònoms continuen anunciant-se al CATNIX ja que tant Jazztel com Nexica hi estan connectats.

El tràfic intercanviat al CATNIX ha augmentat un 52%, i ha passat de 667,75 TB el 2003 a 1.014,67 el 2004. Aquesta xifra és equivalent a transferir vint vegades tot el text d'una Gran Enciclopèdia Catalana cada minut (figura 47). En mitjana, l'Anella Científica ha aportat un 18% del tràfic total intercanviat i n'ha obtingut un 5%.

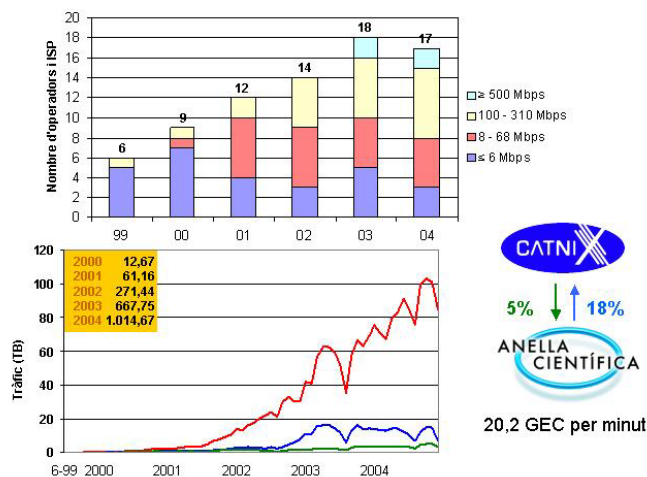


Figura 47. L'evolució del CATNIX

El 2004 s'ha instal·lat un servidor de sincronització de temps per xarxa (NTP). D'entre les empreses consultades, es va triar la solució de Meinberg per motius econòmics i per proximitat del distribuïdor. A més, aquest equipament usa programari intern lliure (figura 48).



Figura 48. Servidor de sincronització de temps per xarxa

4.5. Altres serveis

El Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS) ha experimentat 10 noves incorporacions (2 allotjaments i 8 hostatges) i dues baixes. En total, hi ha 11 servidors allotjats i 88 hostatjats.

Els nous servidors allotjats són un del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació per al projecte UNEIX i un del Centre Tecnològic Forestal de Catalunya, i els hostatjats són el domini i el web de la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat, dos dominis de l'Institut Català de Nanotecnologia, dos dominis de l'Institut Català d'Investigació Química, el domini i el web de la Asociación Internacional Política y Gestión Universitaria, el web de l'Observatorio para la CiberSociedad i la base de dades UNEIX del DURSI. Les baixes han estat l'allotjament del servidor de l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya i l'hostatge del web *Transfíne* de l'EUCCN.

A més de proveir de connectivitat les institucions connectades, l'Anella pot proporcionar connexió esporàdica a esdeveniments científics i tecnològics que la requereixin per al seu funcionament. El 2004 el congrés sobre Internet i les noves tecnologies Internet Global Congress, integrat en la seva sisena edició dins la Fundació Barcelona Digital, ha disposat de connectivitat a través de l'Anella Científica, mitjançant la connexió Giganet que Al-Pi Telecomunicacions va proporcionar entre el Palau de Congressos i l'Anella del 10 al 14 de maig.

Per a la Fundació I2CAT, el CESCA ha configurat manualment una xarxa privada virtual a través d'un túnel MPLS que ha proporcionat una connexió transparent entre l'equipament òptic d'I2CAT i el de Géant, situat a Nova York, oferint així un punt de *virtual peering*. Així, s'ha facilitat el desenvolupament d'una experiència de creació d'un camí òptic entre el node de la xarxa òptica de la Fundació I2CAT que uneix diferents campus de la UPC i els laboratoris a Ottawa del Centre de Recerca en Comunicacions de Canadà.

Enguany s'han rebut 1.247 **consultes** (figura 49), de les quals 945 s'han pogut resoldre al moment. La major part de les consultes han estat relacionades amb seguretat (16%), encaminament (11%), servidors allotjats i hostatjats (10%), accés remot (10%), interrupció del servei (9%) i connexions i correu electrònic (8%).

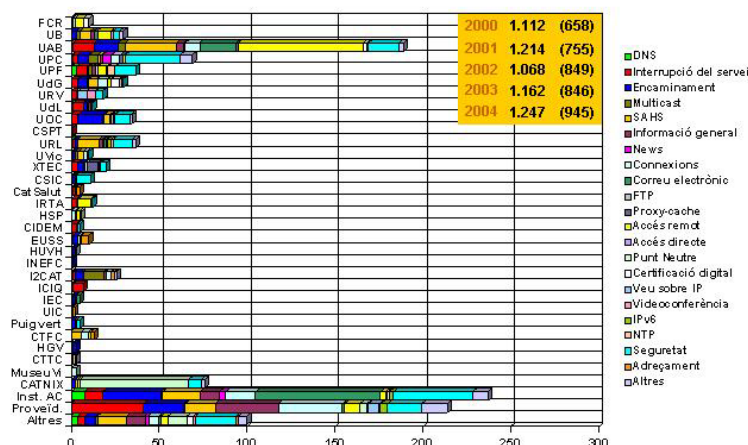


Figura 49. Les consultes de comunicacions

5. La promoció

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

5.1. Formació

La vuitena Trobada de l'Anella Científica (TAC) va celebrar-se el 2 de juny a l'Institut Cartogràfic de Catalunya (ICC), al Parc de Montjuïc. Mentre que les anteriors edicions de la TAC sempre havien tingut lloc en un escenari universitari, per primera vegada ha estat un centre de recerca connectat a l'Anella qui ha acollit la Trobada.

La TAC'04 va comptar amb tres presentacions i una taula rodona, en què van participar sis ponents (figura 50). Aquesta Trobada va reunir 86 assistents, directius i professionals de les Tecnologies de la Informació, i va estar dedicada a tractar temes com ara la seguretat informàtica, la certificació digital i la infraestructura de dades espacials de Catalunya. A més, també van intervenir representants de les cinc institucions que s'han connectat a l'Anella Científica des de l'anterior TAC per presentar-les.

<p>09.30 Benvinguda Jaume Miranda, ICC Francesc Xavier Hernández, DURSI Jordi Mas, FCR</p> <p>09.45 Infraestructura de Dades Espacials de Catalunya (IDEC) Jaume Miranda, ICC</p> <p>10.15 El rol de les administracions públiques en el desenvolupament del certificat digital i en l'ús de la signatura digital Jordi Masias, CATCert</p> <p>10.45 Presentació de les noves institucions adherides</p> <p>11.10 Descans</p> <p>11.40 IPv6 Security Considerations Carles Batalla, Cisco Systems</p> <p>12.00 Debat obert sobre xarxes i seguretat <i>Ponents</i> Carles Frago, CESCA Pere Barlet, UPC Juan Luis Montero, UPCnet Simon Dyer, Satec Eliás Valea, IPM Juan Luis Hernández, Networks Test <i>Moderador</i> Dídac López, UdG</p> <p>13.50 Cloenda Miquel Huguet, CESCA</p>	 <p>Institut Cartogràfic de Catalunya 2 de juny de 2004 Barcelona</p> <p>Assistents: 86</p> <p>Comissió organitzadora: Teresa Grané (UPF) Miquel Huguet (CESCA) Dídac López (UdG) Francesc Noguera (UOC)</p>
---	--

Figura 50. Trobada de l'Anella Científica

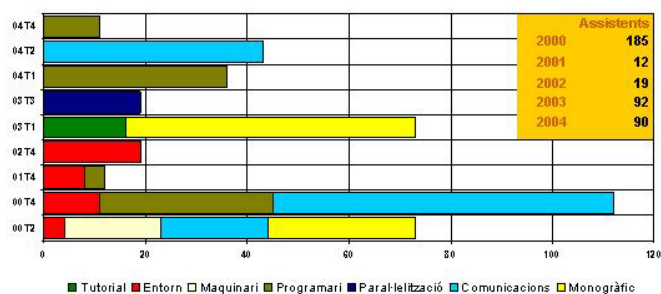
En les conclusions de la taula rodona, dedicada a xarxes i seguretat, el cap del Servei Informàtic de la UdG, Dídac López, que va ser el moderador, va destacar la necessitat de continuar treballant de manera conjunta en la gestió del risc dins de la seguretat de la xarxa, així com en l'ús de noves eines d'anàlisi.

Sota el títol “La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos”, va tenir lloc la cinquena edició de la TSIUC. La trobada va celebrar-se el 24 de novembre a l'IN3 de la UOC, a Castelldefels, i hi van assistir 130 representants d'universitats i d'altres institucions. La TSIUC va voler oferir diferents elements per a l'anàlisi dels beneficis de l'ús de la certificació digital. Per això, la trobada va comptar amb presentacions de caràcter tècnic, legal i l'exposició d'un cas concret d'implantació. En total van ser quatre presentacions i una taula rodona (figura 51).



Figura 51. Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya

En la cloenda, Ramon Vilaseca, director general d'Universitats, va oferir el suport del Govern per a la implantació de la certificació digital, l'ús de la qual espera que sigui una realitat ben aviat. Recollint algunes conclusions de la taula rodona, Vilaseca va destacar el paper de la certificació digital per millorar el servei que ofereixen les universitats.



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) 
- Modelització molecular (38, 95T2)
- Serveis de certificació a Internet (38, 00T4)
- Introducció als algorismes genètics (37, 98T4)
- Introducció a l'ús de Perl en la resolució de problemes bioinformàtics (36) 
- Density Functional Theory (36, 95T1)
- Chasing the Bug (34, 00T4)

Figura 52. Aula de Noves Tecnologies

S'ha organitzat una Aula de Noves Tecnologies que ha comptat amb tres cursos. Del curs "Introducció a l'ús de Perl en la resolució de problemes bioinformàtics" s'han organitzat dues edicions en col·laboració amb el Grup de Reconeixement Molecular dirigit pel Dr. Modesto Orozco de l'Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona (Parc Científic de Barcelona, UB). El curs "Servei de Certificació Digital: Operativa de les Entitats de Registre Virtuals" s'ha organitzat en col·laboració amb l'Agència Catalana de Certificació (CATCert), i s'ha situat entre els més populars organitzats al Centre (figura 52). Finalment, s'ha organitzat el "Curs d'Eines de Desenvolupament de KeyOne®" amb Jordi Planas, de Safelayer, per al desenvolupament d'aplicacions que incorporin tecnologia PKI o la integració d'aquesta tecnologia en les existents. En total, 90 persones han seguit els cursos organitzats dins l'Aula de Noves Tecnologies.

A més, s'ha portat a terme un seminari: "Workshop MAX-INF sobre Phasing i Refinement", que es va concentrar en la resolució i el refinament d'estructures macromoleculares de cristall, fent una introducció general als mètodes computacionals actuals. Aquest seminari va comptar amb 72 assistents.

Finalment, s'han organitzat a les instal·lacions del CESCA cinc conferències. El Dr. Hugo Daniel Scolnik, de la Universidad de Buenos Aires, va impartir les de "Criptografia aplicada a les transaccions electròniques" i "Criptografia aplicada a la privadesa i la confidencialitat". Johan Custers i Cristina Marí, d'Itway Ibérica, van participar a la conferència "Seguretat en xarxes sense fils (Wireless LAN)". Finalment, Bruno Cherele, de Tripos Inc., va introduir el producte de la seva empresa: "Tripos Software Presentation". Dins de la Setmana de la Ciència, el Dr. Eduard Salvador, de la Universitat de Barcelona, va impartir la conferència "Buscant entendre com s'han format les galàxies". Aquestes conferències van comptar amb un total de 196 assistents. A l'annex XIII trobareu la relació de les conferències impartides i més informació de les activitats mencionades.

5.2. Difusió

Enguany s'ha continuat dedicant esforços per potenciar la difusió del Centre i les seves activitats. Així, diferents mitjans de comunicació han publicat informació sobre les trobades TAC'04 i TSIUC'04. També han tingut un impacte mediàtic la incorporació de la URL al Consorci del CESCA i el servei Tesis Doctorals en Xarxa; aquest any se n'ha parlat amb motiu de la incorporació de les tesis 1.500, 2.000 i la primera de la URL. Els mitjans de comunicació també s'han fet ressò del projecte GaiaGrid, així com de les diverses incorporacions al CAT-NIX. Aquestes activitats han estat recollides per mitjans de comunicació generalistes (*Diari de Barcelona, El Periódico, El País, Agència Efe, TV3, Catalunya Ràdio, Cadena Ser, etc.*) i especialitzats (*Computer World, Vilaweb, Space Daily, ESA, Seguridad en Informática y Comunicaciones, Expansión, Cinco Días, etc.*).

El CESCA ha continuat la tasca de fer arribar als usuaris, i al públic en general, les activitats i novetats en els camps de la supercomputació i les comunicacions a través de la seva publicació, *Teraflop*, de la qual s'han publicat sis números.

Com cada any, s'ha participat en la Setmana de la Ciència, organitzada per la Fundació Catalana per a la Recerca. S'ha celebrat una Jornada de Portes Obertes per donar a conèixer el Centre i els serveis que proporciona a la comunitat científicotècnica. Aquesta Jornada ha permès que 131 persones de diferents àmbits poguessin visitar les nostres instal·lacions. A més, el CESCA ha rebut també visites provinents d'universitats i de centres d'ensenyament secundari, de forma que un total de 277 persones han pogut conèixer el Centre gràcies a aquestes visites guiades, de les quals trobareu els detalls a l'annex IX.

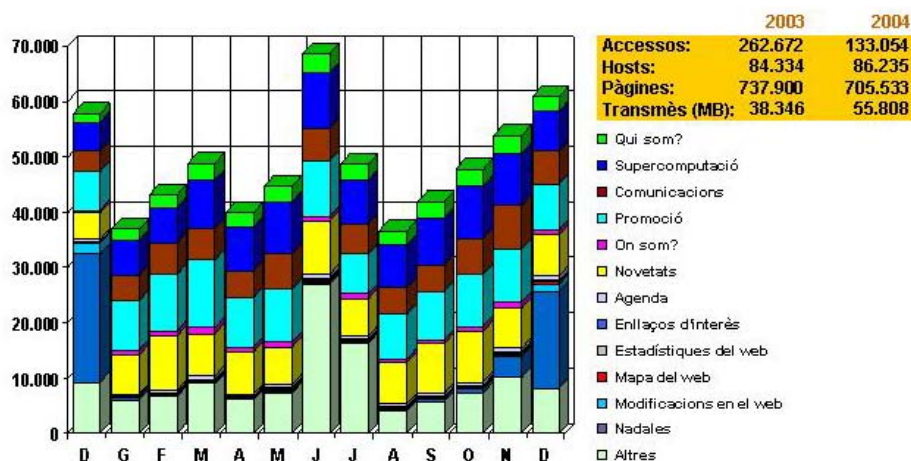


Figura 53. Els accessos al web

El nombre d'accessos a la pàgina principal del web ha passat de 262.672 el 2003 a 133.054 el 2004, portats a terme per 86.235 *hosts* diferents (figura 53). Les pàgines més visitades han estat les de promoció (19%), supercomputació (17%), novetats (17%) i comunicacions (12%).

Al web s'han publicat 89 novetats, totes elles incloses a l'annex XII. Les més destacades han aparegut en les deu portades del web que es troben a l'annex XI. L'annex X recull el sumari dels webs (*cesca.es*, *catnix.net* i *tdx.cesca.es*).

Annex I:

Els acrònims

Òrgans de govern i assessors

CG	Consell de Govern
CoPe	Comissió Permanent
COT	Comissió d'Organització de les Trobades TAC i TSIUC
COJ	Comissió d'Organització de la JOCS
CSIUC	Comissió dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya
CTAC	Comissió Tècnica de l'Anella Científica
GUCAP	Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació
GUSCF	Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors
GTAAC	Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Comunicacions
GTAAF	Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Cerca de Farmacòfors
GTAAS	Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Supercomputació
GTPD	Grup de Treball de Protecció de Dades
CdSC-SCD	Comissió de Seguiment i Control del Servei de Certificació Digital
GTSCD	Grup de Treball del Servei de Certificació Digital
GTSEG	Grup de Treball de Seguretat Informàtica
PN/E	Comissió Executiva del CATNIX
PN/T	Comissió Tècnica del CATNIX

Supercomputació

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
ENTS	Experimentació en Noves Tecnologies de Supercomputació
SCF	Servei de Cerca de Farmacòfors
SED	Servei d'Emmagatzematge de Dades

Àrees de coneixement per als projectes de supercomputació

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

Comunicacions

EC-UR	Entitat de Certificació d'Universitats i Recerca
-------	--

ER-UR	Entitat de Registre d'Universitats i Recerca
ERV	Entitat de Registre Virtual
ERIAC	Equip de Resposta a Incidents a l'Anella Científica
SxAC	Serveis Addicionals de l'Anella Científica
SAD	Servei d'Accés Directe
SAR	Servei d'Accés Remot
SAV	Servei de Videoconferència
SCD	Servei de Certificació Digital
SEG	Servei de Seguretat Informàtica
S24x7	Servei de manteniment 24 hores, 7 dies a la setmana
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 els tres òrgans de govern del CESCA (Consell de Govern, Comissió Permanent i Comissió Executiva del CATNIX), els cinc òrgans assessors (CTAC, GUSCF, GUCAP, CSIUC i Comissió Tècnica del CATNIX) i dos dels grups de treball existents (GTSEG i GTSCD).

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, La Seda de Barcelona

Vicepresident

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

fins al 28-01: Lluís Jofre i Roca

Vocals

Oriol Ferran i Riera

Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Inf.

fins al 23-01: Jordi Alvinyà i Rovira

Francesc Xavier Hernández i Cardona

Director general de Recerca

fins al 02-06: Marta Aymerich i Martínez

fins al 23-01: Antoni Oliva i Cuyàs

Ramon Vilaseca i Alavedra

Director general d'Universitats

Narcís Mir i Soler

Subdirector general d'Indústria

fins al 23-01: Antoni Gurguí i Ferrer

Joan Tugores i Ques

Rector, Universitat de Barcelona

Lluís Ferrer i Caubet

Rector, Universitat Autònoma de Barcelona

Josep Ferrer i Llop

Rector, Universitat Politècnica de Catalunya

M. Rosa Virós i Galtier

Rectora, Universitat Pompeu Fabra

Joan Batlle i Grabulosa

Rector, Universitat de Girona

Lluís Arola i Ferrer

Rector, Universitat Rovira i Virgili

Joan Viñas i Salas

Rector, Universitat de Lleida

Gabriel Ferraté i Pascual

Rector, Universitat Oberta de Catalunya

Esther Giménez-Salinas i Colomer

Rectora, Universitat Ramon Llull

Lluís Calvo i Calvo

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

Oriol Ferran i Riera Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Inf.
fins al 02-06: Marta Aymerich i Martínez
fins al 23-01: Antoni Oliva i Cuyàs

Vicepresident

Enric Banda i Tarradellas Director, Fundació Catalana per a la Recerca
fins al 28-01: Lluís Jofre i Roca

Secretari

Miquel Huguet i Vilella Director, CESCA

Vocals

Francesc Gòdia i Casablanca Vicerector de Projectes Estratègics, UAB
Cristina Barrado i Muxí Vicerectora adjunta de les TIC, UPC
Daniel Serra de la Figuera Vicerector d'Economia, Promoció i Serveis, UPF
Joaquim Salvi i Mas Vicerector de Campus, UdG
Antoni González i Senmartí Vicerector de Campus i Relacions Institucionals, URV
des del 06-05-04

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 al seu funcionament. La seva composició és la següent:

President

Oriol Ferran i Riera Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Inf.
fins al 23-01: Jordi Alvinyà i Rovira

Vicepresident

Narcís Mir i Soler Subdirector general d'Indústria
fins al 23-01: Antoni Gurguú i Ferrer

Vocals

Enric Banda i Tarradellas Fundació Catalana per a la Recerca
Gonçal Bonhomme i Altable Al-Pi Telecomunicacions
fins al 23-01: Arnold Ghinsberg
Juan Antonio Solis Coello Datagrama (fins al 25-02)

Marc Vives i Pizà	Universitat Pompeu Fabra
Joan Fontcuberta i Solà	Universitat de Girona
Encarna Pérez i Ruí	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
Montserrat Camps i Pi	Universitat Ramón Llull (fins al 20-02)
Jordi Tuneu i Oliva	Universitat de Vic
Jordi Orgué i Bella	Departament d'Educació, Generalitat de Catalunya
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
fins al 19-11: Francesc Guillen i Martínez	
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
fins al 06-09: Gemma Casasampera i Fernández	
Albert Cabeza i Lorient	CIDEM
Jordi Borrell i Font	INEFC
Manel Tristán-Polo i Sánchez	Agència de Salut Pública de Barcelona
Jordi Cebrià i Escolà	Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya
Jordi Javier Prat i Grau	Universitat Internacional de Catalunya
Feliu Maseras i Cuní	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
Manel Peña i Camacho	Institut d'Estudis Catalans
des del 03-03	
Miquel Pontes i García	Fundació Puigvert
des del 30-04	
Sebastià Caro i Gómez	Hospital General de Vic
des del 07-06	
Manel Gallegos i Navarro	Institut d'Estadística de Catalunya
des del 03-09	
Jordi Varela i Agrelo	Escola Superior de Música de Catalunya
des del 09-09	
Julia Osorio i Ortega	Fundació del Gran Teatre del Liceu
des del 21-10	
Secretària	
Caterina Parals i Colom	CESCA

5. Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors

El Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors (GUSCF) va crear-se l'any 1997 i està constituït pels representants de les institucions acadèmiques i industrials que accedeixen al servei de cerca en bases de dades de compostos d'interès farmacològic.

President

Miquel Huguet i Vilella CESCA

Vicepresidents

Modesto Orozco i López Institut de Recerca Biomèdica, Parc Científic de BCN
Robert Soliva i Soliva J. Uriach i Cia, S.A.

Vocals

Juan Jesús Pérez i González Vicerector de Doctorat, Recerca i Rel. Int., UPC
Jordi Quintana i Ruiz Laboratoris Dr. Esteve
Jordi Mestres i López IMIM, UPF
Miquel Pons i Vallès Dept. Química Orgànica, UB
Antonio Romero Garrido Centre d'Investigacions Biològiques, CSIC
Angel Messeguer i Peypoch IIQAB, CSIC
Josep Font i Cierco Dept. Química, UAB
Lluís Anglada i Burniol Ferrer Internacional, S.A.
Eduardo Salas Pérez-Rasilla Lácer, S.A. (fins al 02-01)
Manuel López i Martínez Almirall Prodesfarma, S.A.
Ana Castro Morera Instituto de Química Médica, CSIC
María Font Arellano Facultad de Farmacia, UNAV

Secretari

Joan Cambras i Pajarols CESCA

6. Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació

La Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GUCAP) va constituir-se l'any 2000 per debatre els temes de càlcul d'altres prestacions (polítiques d'assignació de recursos, criteris per a les noves adquisicions de maquinari i programari, formació...) per tal de millorar els nostres serveis. Està constituïda pels caps dels 10 projectes de més consum i un màxim de vuit experts.

President

Miquel Huguet i Vilella Director, CESCA

Vicepresident

Santiago Olivella i Nel·lo IIQAB, CSIC

Vocals

Antonio Aguilar i Navarro	Dept. Química Física, UB
Santiago Álvarez i Reverter	Dept. Química Inorgànica, UB
Bernat Codina i Sánchez	Dept. Astronomia i Metereologia, UB (fins al 16-11)
Ildefonso Cuesta i Romero	Dept. Enginyeria Mecànica, URV
Miquel Duran i Portas	Institut de Química Computacional, UdG
Antonio González i Colàs	Dept. Arquitectura de Computadors, UPC
Emili Hernández i Chiva	Institut de Ciències de la Terra "Jaume Almera", CSIC
Francesc Illas i Riera	Dept. Química Física, UB
Agustí Lledós i Falcó	Dept. Química, UAB
Josep Ma. Lluch i López	Dept. Química, UAB
Juan José Novoa Vide	Dept. Química Física, UB
Baldomero Oliva i Miguel	Dept. IMIM (Informàtica Mèdica), UPF
Modesto Orozco i López	Institut de Recerca Biomèdica, Parc Científic de Barcelona
Leonardo Pardo Carrasco	Dept. Bioestadística, UAB
Mariona Sodupe i Roure	Dept. Química, UAB
Jordi Torra i Roca	Institut d'Estudis Espacials de Catalunya

Secretari

Joan Cambras i Pajarols	Dept. d'Assistència Tècnica, CESCA
-------------------------	------------------------------------

7. Comissió dels Serveis Informàtics de les U. de Catalunya

La Comissió dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (CSIUC) també va crear-se l'any 2000 per debatre i reflexionar tant sobre els serveis del CESCA a la comunitat universitària com les pròpies experiències en la gestió acadèmica, i per coordinar l'elaboració dels programes per a les trobades TAC i TSIUC. Aquesta comissió està integrada per un representant de cadascuna de les dotze universitats connectades a l'Anella Científica, majoritàriament directors dels serveis informàtics.

President

Miquel Huguet i Vilella	Director, CESCA
-------------------------	-----------------

Vicepresidenta

Teresa Grané i Viadé	Servei d'Informàtica, UPF
----------------------	---------------------------

Vocals

Jaume Arona i Corominas	Centre d'Informàtica, UB
Lorenzo Rodríguez i Martín	Servei d'Informàtica, UAB
Jordi Bofill i Abelló	Servei d'Informàtica, UPC
Didac López i Viñas	Serveis Informàtics, UdG
Lluís Ariño i Martín	Servei d'Informàtica, URV
fins al 10-09: Francesc Salvador i Carvajal	

Carles Mateu i Piñol
Francesc Noguera i Puig
Xavier Canaleta i Llampallas
Raymond Lagonigro i Bertran
Vicente Sangrador i Palacios
Pedro Ochoa i Rodrigo
des del 19-11

Serveis Informàtics, UdL
Dept. d'Informàtica, UOC
Serveis Informàtics, URL
Serveis Informàtics, UVic
Serveis Informàtics, UIC
Dept. d'Informàtica, UAO

Secretària

Caterina Parals i Colom
e.f. des del 23-02

Dept. de Comunicacions i Operacions, CESCA

8. 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 al seu funcionament.

President

Miquel Huguet i Vilella

CESCA

Vocals

Marcel Antràs i Puchal
David Suárez i Quesada
Santiago Mercado Garrido
Víctor Carbonell i San José
Xavier Raurell i Guxens
Victoria Gutiérrez Castells
Félix Morgado Sánchez
Carlos Becker Mantecón
Javier Benítez i Jiménez
Angel Jarabo Sevilla
Alfredo Sola Pérez
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 Bodí
des del 13-10

Al-Pi Telecomunicacions
Datagrama (fins al 10-06)
Sarenet
Auna Telecomunicaciones
Institut Català de Tecnologia (fins al 03-02)
BT España
Jazztel Telecomunicaciones
Vodafone
Colt Telecom Barcelona
Easynet España
Intelideas (fins al 13-12)
Telefónica Data España
Adam Internet
Acens Technologies
Red.es
Nexica
Altecom
KAOS Redes IP
KPG Communications
T-Systems Eltec
Flash10

Santiago Cano Serrano
des del 25-11

Iberbanda

Secretària:

Caterina Parals i Colom

CESCA

9. Grup de Treball de Seguretat Informàtica

El Grup de Treball de Seguretat Informàtica (GTSEG) va néixer l'any 2003 fruit d'una proposta realitzada per la CSIUC i aprovada pel Consell de Govern, de data 7 de maig, amb els objectius d'establir polítiques de seguretat comunes, definir procediments i pràctiques en l'ús d'eines robustes per a la gestió de la seguretat (actives i reactives, tallafocs, detecció, gestió d'amplada de banda, antivirus, etc.), establir criteris d'avaluació de la gestió de la seguretat, la coordinació de les consultes de seguretat amb una assessoria jurídica especialitzada i col·laborar amb altres grups.

President

Miquel Huguet i Vilella

Director, CESCA

Secretària

Caterina Parals i Colom

Dept. de Comunicacions i Operacions, CESCA

Vocals

Manuel Pérez i Castillo

Centre d'Informàtica, UB

Francesc Borguny i Graullera

Servei d'Informàtica, UAB

José Ma. Haro i Sánchez

Dept. de Teoria del Senyal i Comunicacions, UPC

Zacariás Sánchez Muñoz

Servei d'Informàtica, UPF

fins al 03-12: Jordi Mas i Parareda

Joan Fontcuberta i Solà

Serveis Informàtics, UdG

Lluís Ariño i Martín

Servei d'Informàtica, URV

Carles Mateu i Piñol

Àrea de Sistemes d'Informació i Comunicacions, UdL

Pedro Mínguez de la Villa

Infraestructures Tecnològiques, UOC

Jaume Abella i Fuentes

Escola d'Enginyeria i Arquitectura La Salle, URL

Raymond Lagonigro i Bertran

Serveis Informàtics, UVic

Jordi Orgué i Bella

Dept. d'Educació, Generalitat de Catalunya

des del 09-12

Carles Fragoso i Mariscal

Dept. de Comunicacions i Operacions, CESCA

10. Grup de Treball del Servei de Certificació Digital

El GTSCD també va crear-se l'any 2003 amb l'objectiu de determinar les accions a emprendre per tal que les universitats i centres de recerca siguin capdavanteres en l'ús de la signatura

electrònica, tot investigant en els seus possibles usos adaptats a les necessitats de les institucions. Està format per:

President

Miquel Huguet i Vilella

Director, CESCA

Secretària

Caterina Parals i Colom

Cap de Comunicacions i Operacions, CESCA

Vocals

Sílvia Nolla i Lacruz

Cap d'Organització i Qualitat, UB

fins al 07-07: Ernest Trias i Ferrer

Montserrat Balagueró i Baró

Cap de l'Oficina d'Estudis i de Gestió de la Inf., UAB

Gonzalo Ruiz i Marín

Servei de Gestió Acadèmica, UPC

fins al 07-07: Francisco J. Navallas i Ramos

Cristina Oliva i Berini

Vicegerent Àrea d'Innov. i Coordinació de Proj., UPF

Miquel Casademont i Donay

Cap de la Unitat de Gestió Doc., Arxiu i Registre, UdG

fins al 21-06: Salvador Bramon i Sunyer

Lluís Ariño i Martín

Coordinador Serveis Informàtics, URV

fins al 28-09: Àngels Olivé i Conde

Jaume Esteban i Almenara

Àrea de Sistemes d'Informació i Comunicacions, UdL

Jesús Sánchez i Tenedor

Departament d'Atenció a l'Estudiant, UOC

Emilià Pola i Robles

Gerent ACER, FCR

Josep Solé i Altadill

Director del Dept. d'Informàtica, IRTA

Maite Ruíz i García

Dept. de Comunicacions i Operacions, 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 2004. Per cada projecte s'inclou: el títol, el cap i el percentatge de consum, el departament i la institució, i una breu descripció.

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

Francisco Muñoz

20,7%

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 composts 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.

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

Mariona Sodupe

10,8%

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 core 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 a 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.

3. Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició

Agustí Lledós

7,5%

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 propers possibles 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.

El 2004, en col·laboració amb un equip rus s'ha posat de manifest, per primera vegada, la formació d'enllaços d'hidrogen hidrur-protó entre hidrurs dels grups de l'esquerra de la taula periòdica i àcids febles com són els alcohols fluorats i s'ha apuntat la importància d'aquestes interaccions en les reaccions de protonació dels complexos, que condueixen a l'eliminació d'H₂. El grup ha continuat explorant, en col·laboració amb el grup experimental de la Prof. P. González-Duarte (UAB), la química dels complexos amb anells {Pt₂S₂}, amb especial atenció a la seva reactivitat. Es disposa de resultats preliminars molt prometedors sobre possibles aplicacions d'aquests compostos pel trencament d'enllaços C-F.

A més, l'atmosfera de col·laboració entre grups de l'àmbit de la química teòrica, a la que ajuda notablement l'existència del CESCA, ha permès també endegar estudis computacionals en col·laboració amb altres grups teòrics catalans. En col·laboració amb el Prof. J. M. Lluch (UAB) s'han interpretat les propietats inusuals dels anomenats complexos d'hidrogen "allargats" i s'ha escrit un article de revisió sobre el tema. En col·laboració amb el Prof. S. Álvarez (UB) s'han fet propostes sobre la possible existència d'isomers estructurals en compostos amb anells M₂S₂. Com a fruit dels programes de mobilitat del CESCA-CEPBA, s'ha completat l'estudi de la flexibilitat estructural de complexos amb lligands bifosfinina.

4. 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.

5. Reconeixement molecular

Modesto Orozco

5,2%

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 algorismes per tractar la problemàtica de la solvatació en proteïnes.

6. Estructura i propietats dels polímers: càlculs electrònics, simulacions atomístiques i models coarse-grained

Carlos Alemán 4,5%
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 el desenvolupament de models mesoscòpics per a 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.

7. GAIA, el cens de la nostra galàxia

Jordi Torra 4,3%
Astronomia i Meteorologia IEEC

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 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 del 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).

8. Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic

Juan José Novoa 4,0%
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 intermoleculares que es produeixen en els mateixos 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. Per últim, 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.

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

Josep Maria Lluch 3,7%
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 "soy-bean 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.

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

Francesc Illas 3,6%
 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. Catàlisi enantioselectiva

José Manuel Saà 3,3%
 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 mecanístics 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.

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

Miquel Duran 3,2%
 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 mètodes ja existents que permeten extreure informació d'interès de les densitats mono i bioelectrònica.

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

Santiago Olivella 2,8%
 IIQAB CSIC

L'objectiu general del projecte es centra en fer un estudi detallat, en condicions troposfèriques, dels mecanismes de l'hidroxilació del furà, la posterior oxidació dels derivats hidroxilats i l'acoblament d'alguns d'aquest productes amb el cicle dels òxids de nitrogen (NOx). L'estudi permetrà també calcular, des del punt de vista teòric, una sèrie de paràmetres termodinàmics (entalpies i entropies de reacció) i cinètics (entalpies i entropies d'activació) de les diferents reaccions involucrades.

14. *Dinàmica de reaccions químiques elementals*

Antoni Aguilar

2,6%

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 a 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.

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

Ramon Sayós

1,9%

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 que 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.

16. *Dinàmica molecular dels complexos d'inclusió*

Carles Jaime

1,6%

Química

UAB

La formació de complexos d'inclusió amb ciclodextrines modifica les propietats fisico-químiques 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 medi d'estudis d'RMN. El nostre objectiu és entendre i determinar la geometria 3D emprant tècniques computacionals com la Dinàmica Molecular.

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

Miguel González

1,4%

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 quasi-clàssiques i mètodes mecano-quàntics aproximats.

18. *Anàlisi computacional de biomolècules*

Jordi Villà

1,3%

IMIM – Informàtica Biomèdica

UPF

El projecte té com a objectiu general el modelatge de sistemes moleculars d'interès biològic mitjançant mètodes computacionals. En particular, s'aborda el modelatge de receptors acoplats a la proteïna G (GPCR), l'estudi de la interacció amb els seus lligands, amb la finalitat de contribuir al desenvolupament de nous fàrmacs.

19. *Modelització i interpretació d'espectres de ressonància magnètica nuclear en ciència de materials*

Jordi Casanovas 1,3%
Química UdL

L'objectiu del projecte de recerca és investigar l'estructura de diferents materials d'interès tecnològic en Ciència de Materials tot comparant l'espectre de Ressonància Magnètica Nuclear (RMN) experimental amb el que s'obté d'una simulació teòrica. Això implica, en primer lloc, modelitzar l'estructura del material i, posteriorment, calcular i interpretar el desplaçament químic que correspon a cadascun dels àtoms que formen el model. Com resultat s'obté informació sobre l'estructura dels materials estudiats i es podran interpretar diverses propietats físiques i químiques que els caracteritzen.

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

Pablo Jesús Ordejón 1,1%
ICMAB - Materials Moleculars i Supramoleculars CSIC

Aquest projecte pretén estudiar diversos problemes en materials i dispositius d'interès tecnològic. Amb aquest fi 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.

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

Anna Serra 1,1%
Matemàtica Aplicada III UPC

Recentment s'ha desenvolupat un nou mètode de simulació atòmica que permet estudiar el moviment de les dislocacions sense restriccions degut a 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.

22. *Simulació de dinàmica molecular de sistemes biomoleculars*

Xavier Daura 0,9%
Institut de Biotecnologia i Biomedicina 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 tòpics: 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.

23. *Dinàmica no lineal de sistemes químic-físics*

Francesc Sagués 0,8%
Química Física UB

S'investiguen diferents aspectes d'autoorganització espaciotemporal associats a la dinàmica no lineal de certs sistemes químic-físics. 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·lització quasi-bidimensional.

24. *Efecte del desordre en materials magnètics: desordre composicional, camps aleatoris i vacants*

Carlos Frontera 0,7%
ICMAB - Materials Magnètics i Superconductors CSIC

L'objectiu principal del projecte que es presenta és l'estudi de les propietats d'equilibri de sistemes magnètics desordenats en dues vessants. La primera és una revisió del seu diagrama de fases a baixa temperatura. La segona és estudiar la distribució de la mida de les allaus que es produeixen quan un camp extern condueix el sistema, pel

camí d'equilibri, a través d'una transició de fase de primer ordre. Això permetrà la comparació amb la distribució d'allaus trobada per camins metaestables.

25. *Interaccions anió- π*

Pere Maria Deyà

0,7%

Química

UIB

Encara que es pugui trobar abundant bibliografia sobre compostos aromàtics, el concepte d'aromaticitat gaudeix d'una manca important de metodologies per quantificar-lo rigorosament. La justificació més important d'aquesta realitat és que, mentre que diferències entre magnituds com els ordres d'enllaç, les càrregues atòmiques i l'electronegativitat són propietats moleculars que es poden analitzar, l'aromaticitat és una propietat que s'obté per diferència entre qualques propietats de la molècula i les corresponents a una molècula hipotètica "no aromàtica" que s'adopta com a sistema de referència. Com no existeix una definició rigorosa dels sistemes de referència que s'han d'utilitzar, l'elecció d'aquests sistemes es converteix en el principal obstacle per quantificar l'aromaticitat. Els àcids oxocarbònics i els seus anions són exemples en els quals els diferents criteris d'avaluació d'aromaticitat fonamentats en l'elecció de sistemes de referència no condueixen a resultats satisfactoris i només el criteri NICS (*Nucleus Independent Chemical Shift*) sembla oferir certa garantia i coherència de resultats. Els índexs d'enllaç de Wiberg i els desplaçaments químics de ^{17}O NMR sembla que també poden ser útils per estudiar els derivats oxocarbònics objecte d'aquest projecte.

26. *Estudi teòric de reaccions d'interès en química atmosfèrica*

Albert Solé

0,6%

Química Física

UB

Fent servir càlculs mecano-quàntics s'estudien les reaccions d'oxidació en fase gasosa de compostos orgànics volàtils, iniciades per radicals OH i acoblades al cicle d'oxidació de l'NO a NO₂, que contribueixen a la generació fotoquímica de l'ozó a la troposfera de les grans concentracions urbanes o industrials. L'objectiu principal és esbrinar el mecanisme detallat d'aquestes reaccions i determinar els paràmetres termodinàmics i cinètics de les diferents reaccions elementals potencialment involucrades en els processos globals de degradació troposfèrica de compostos orgànics volàtils.

27. *Catàlisi de processos químics i química supramolecular*

Feliu Maseras

0,6%

Química

ICIQ

La química computacional és una eina bàsica en l'atac multidisciplinar 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.

28. *Estudi ab initio de processos de quimisorció i catàlisi*

Josep Manel Ricart

0,5%

Química Física i Inorgànica

URV

S'utilitzen mètodes *ab initio* per modelitzar fenòmens sobre superfícies que inclouen etapes rellevants en catàlisi heterogènia i processos electroquímics. Els sistemes utilitzats són agregats finits d'àtoms metàl·lics que modelitzen la zona local d'una superfície de metall o bé models periòdics infinits. L'objectiu és caracteritzar la geometria, les propietats electròniques, el tipus d'enllaç, la reactivitat i els espectres IR teòrics de petites espècies absorbides orgàniques sobre metalls de transició. També es considera l'estructura i la caracterització espectroscòpica d'espècies en condicions electroquímiques i ultra alt buit.

29. *Computació d'altres prestacions*

Mateo Valero

0,4%

Arquitectura de Computadors

UPC

En aquest projecte es fa una avaluació de propostes a nivell d'arquitectura de computadors utilitzant *benchmarks*. Per a dur a terme aquesta avaluació s'implementen simuladors d'arquitectures (escalars, vectorials, multipro-

cessadors, etc.) a un nivell de detall que requereix una elevada capacitat de procés i eines de compilació per a la generació eficient del codi que permeten avaluar l'impacte d'aquestes propostes en l'execució d'aplicacions reals.

30. Encaixar l'arbre de la vida: la filogènia de les aranyes

Miquel Àngel Arnedo

0,4%

Biologia Animal

UB

El projecte ATOL: *The Phylogeny of Spiders* té com a principal objectiu l'elaboració d'una filogènia de l'ordre Araneae, les aranyes, en base a l'anàlisi combinada de dades moleculars, morfològiques i comportamentals de vora 500 espècies d'aranyes. La grandària de la matriu de dades, així com l'elevat requeriment computacional del mètode d'inferència filogenètica seleccionat, ha fet necessària la participació del CESCA en el projecte, proporcionant accés als seus sistemes de computació en paral·lel.

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

	QT	MM	FI	CT	MN	IN	Altres	Subtotal
UB	20,7%	5,2%					0,4%	26,3%
UAB	22,0%	2,5%						24,5%
UPC		4,5%	1,0%			0,4%		5,8%
UdG	3,2%							3,2%
CSIC	3,9%		5,0%					8,9%
UIB	24,7%							24,7%
Altres	2,4%	1,3%						3,7%
Total	76,8%	13,6%	6,0%			0,4%	0,4%	97,1%

Si s'inclouen tots els 77 projectes, la distribució percentual és:

	QT	MM	FI	CT	MN	IN	Altres	Subtotal
UB	20,7%	5,4%	0,2%	0,1%			0,6%	27,1%
UAB	22,0%	2,7%					0,1%	24,8%
UPC		4,5%	1,0%	0,1%	0,03%	0,8%		6,4%
UdG	3,2%							3,2%
CSIC	4,1%		5,2%	0,2%				9,5%
UIB	24,8%							24,8%
Altres	2,5%	1,4%	0,1%		0,02%		0,1%	4,1%
Total	77,3%	14,1%	6,5%	0,4%	0,1%	0,8%	0,8%	100,0%

Si s'acumula el consum per al període 1996-2004, la distribució percentual és:

	QT	MM	FI	CT	MN	IN	Altres	Subtotal
UB	29,9%	8,3%	1,2%	0,4%			0,5%	40,2%
UAB	22,7%	4,1%	0,2%					27,0%
UPC		3,0%	0,9%	0,4%	0,1%	1,1%		5,5%
UPF		1,6%						1,6%
UdG	2,9%							2,9%
URV	1,4%				0,2%			1,6%
UdL	0,7%							0,7%
CSIC	3,1%		2,4%	0,1%				5,7%
UIB	11,6%							11,6%
Altres	1,3%	0,1%	0,5%	0,2%	0,2%	0,6%	0,3%	3,1%
Total	73,6%	17,0%	5,2%	1,1%	0,5%	1,7%	0,9%	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 (Institució)	2000		2001		2002		2003		2004		Total
	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	%
1. S. Álvarez (UB)	4	8	1	14	1	17	1	14	4	6	12,0
2. M. Sodupe (UAB)	1	10	6	7	2	8	4	6	2	11	9,7
3. M. Orozco (UB)	2	8	4	8	4	7	2	9	5	5	8,4
4. A. Lledós (UAB)	5	8	5	7	3	7	3	7	3	8	8,3
5. F. Illas (UB)	3	8	3	8	5	6	7	5	10	4	7,4
6. J.M. Lluch (UAB)	6	7	7	7	6	6	8	4	9	4	7,4
7. F. Muñoz (UIB)	9	4	14	2	7	6	6	5	1	21	7,3
8. J.M. Saà (UIB)	8	5	2	9	8	4	9	4	11	3	4,6
9. A. Aguilar (UB)	7	5	10	3	11	3	15	2	14	3	4,0
10. J.J. Novoa (UB)	11	3	12	2	9	3	13	3	8	4	3,1
11. M. Duran (UdG)	16	3	27	1	26	1	14	2	12	3	3,0
12. C. Alemán (UPC)	22	1	18	1	16	2	10	4	6	5	2,7
13. L. Pardo (UAB)	10	4	8	4	12	3	17	2			2,6
14. M. González (UB)*	14	2	11	2	10	3	5	6	17	1	2,1
15. J.M. Anglada (CSIC)	13	2	9	3	13	3	16	2			1,9
16. J. Villà (UPF)	24	1	38	0	17	1	11	3	18	1	1,8
17. A. Solé (UB)	12	3	17	2	25	1	30	1	26	1	1,7
18. J. Torra (IEEC)	60	0	57	0	14	2	19	2	7	4	1,6
19. J.M. Ricart (URV)	15	2	13	2	19	1	28	1	28	0	1,5
20. R. Sayós (UB)*	14	2	11	2	10	3	21	1	15	2	1,2
21. C. Jaime (UAB)	17	1	55	0	23	1	18	2	16	2	1,0
22. P.M. Deyà (UIB)	29	1	20	1	22	1	24	1	25	1	1,0
23. E. Vilaseca (UB)	21	1	16	2	18	1	26	1	55	0	0,8

Cap de projecte (Institució)	2000		2001		2002		2003		2004		Total
	#	%	#	%	#	%	#	%	#	%	%
24. P.J. Ordejón (CSIC)	36	0	22	1	21	1	24	1	20	1	0,8
25. T.L. Sordo (UNIOVI)			15	2	15	2	29	1			0,8
26. J. Casanovas (UdL)	39	0	35	0	27	1	23	1	19	1	0,7
27. X. Daura (UAB)							12	4	22	1	0,7
28. C. Frontera (CSIC)			34	0	30	1	20	1	24	1	0,7
29. F. Orejas (UPC)	31	1	32	0	34	0	36	0	31	0	0,7
30. M.A. Pericàs (UB)	44	0									0,6

*Fins 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.

Annex IV:

Les publicacions realitzades pels projectes

Aquest annex inclou les referències de les publicacions realitzades¹ pels projectes de supercomputació, classificades per autor i any de publicació, per als anys 2003-04.

Dr. Antoni Aguilar (UB)

- J. de Andrés, M. Sabidó, J.M. Lucas, J. Sogas, A. Aguilar, "Erratum to: Electron capture processes in collisions between Mg(31S0) and Na+(1S0) ions in the 0.10-4.00 keV energy Range", Chemical Physics Letters, vol. 388, 2004, pp. 230.
- M. Sabidó, J. de Andrés, J. Sogas, J.M. Lucas, M. Albertí, J.M. Bofia, A. Aguilar, "Electronic excitation and charge transfer processes in collisions between Mg(3 1S0) atoms and Rb+(1S0) ions in the 0.07 – 4.00 keV energy range", Journal of Chemical Physics, vol. 121, 2004, pp. 5284-5292.
- P. Barragán, L.F. Errea, A. Macías, L. Méndez, I. Rabadán, A. Riera, J.M. Lucas, A. Aguilar, "Study of ab initio molecular data for inelastic and reactive collisions involving the H3+ quasimolecule", Journal of Chemical Physics, vol. 121, 2004, pp. 11629-11638.
- V. Aquilanti, S. Cavalli, A. Simoni, A. Aguilar, J.M. Lucas, "Lifetime of reactive scattering resonances: Q-matrix analysis and angular momentum dependence of the F + H2 reaction the hyperquantization algorithm", Journal of Chemical Physics, vol. 121, 2004, pp. 11675-11690.
- J. González, J.M. Bofill, X. Giménez, "A Bohmian total potential view to quantum effects. I. Methodology and simple model systems", J. Chem. Phys., vol. 120, 2004, pp. 10961-10971.
- F. Pirani, M. Alberti, A. Castro, M.Moix Teixidor, D. Cappelletti, "Atom-bond pairwise additive representation for intermolecular potential energy surfaces", Chemical Physics Letters, vol. 394, 2004, pp. 37-44.
- M. Albertí, D. Cappelletti, A. Castro, A. Laganà, F. Pirani, M. Porrini, "Properties of an atom-bond additive representation of the interaction for the benzene-argon clusters", Chemical Physics Letters, vol. 392, 2004, pp. 514-520.
- J. González, X. Giménez, J.M. Bofill, "Generalized Reaction Path Hamiltonian Dynamics", Theor. Chem. Acc., vol. 112, 2004, pp. 75-83.
- V. Aquilanti, S. Cavalli, D. De Fazio, A. Volpi, A. Aguilar, X. Giménez, J.M. Lucas, "Reactivity enhanced by under-barrier tunneling and resonances: the F +H2 -> HF + H reaction", Chem Phys. Lett., vol. 371, 2003, pp. 504-509.
- M. Albertí, J.M. Lucas, A. Aguilar, "A Quasiclassical Trajectory Study of the multichannel H(1) + H(2)BO ->BO + H2, H(1)BO + H(2), HOB+H Reaction", J. Phys. Chem. A, vol. 107, 2003, pp. 1055-1065.

¹ 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.

Dr. Santiago Álvarez (UB)

- Rodríguez-Forteza, P. Alemany, S. Alvarez, E. Ruiz, "A Theoretical Study of the Exchange Coupling in Hydroxo- and Alkoxo-Bridged Dinuclear Oxovanadium(IV) Compounds", *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2004, pp. 143-153.
- E. Ruiz, A. Rodríguez-Forteza, J. Cano, S. Alvarez, "Theoretical Study of Exchange Coupling in an Fe₁₉ Complex", *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 65, 2004, pp. 799-803.
- M.A. Carvajal, S. Alvarez, J.J. Novoa, "The Nature of the Intermolecular CuI ··· CuI Interactions: a Combined Theoretical and Structural Database Analysis", *Chem. Eur. J.*, vol. 10, 2004, pp. 2117-2132.
- G. Aullón, M. Hamidi, A. Lledós, S. Alvarez, "Chalcogen-chalcogen Bonds in Edge-sharing Square-planar d₈ Complexes. Are They Possible?", *Inorg. Chem.*, vol. 43, 2004, pp. 3702-3714.
- G. Aullón, S. Alvarez, "On the Formation of Sulfur-Sulfur Bonds in Copper Complexes", *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2004, pp. 4430-4489.
- E. Ruiz, "Theoretical Study of the Exchange Coupling in Large Polynuclear Transition Metal Complexes Using DFT Methods", *Struct. Bonding*, vol. 113, 2004, pp. 71-102.
- G. Aullón, G. Esquiús, A. Lledós, F. Maseras, J. Pons, J. Ros, "Unexpected Influence of the Counteranion in the $\kappa 2$ vs $\kappa 3$ Hapticity of Polydentate N-Donor Ligands in [RhI(N-ligand)L₂]⁺ Complexes", *Organometallics*, vol. 23, 2004, pp. 5530-5539.
- X. Ribas, J. C. Dias, J. Morgado, K. Wurst, E. Molins, E. Ruiz, M. Almeida, J. Veciana, C. Rovira, *Chem. Eur. J.*, vol. 10, 2004, pp. 1691.
- E.C. Brown, N.W. Aboelella, A.M. Reynolds, G. Aullón, S. Alvarez, W.B. Tolman, "A New Class of (μ - η^2 : η^2 -Disulfido)dicopper Complexes: Synthesis, Characterization, and Disulfide Exchange", *Inorg. Chem.*, vol. 43, 2004, pp. 3335-3337, 2004.
- M.A. Carvajal, S. Alvarez, J.J. Novoa, "The Choice of Coordination Number in d₁₀ Complexes of Group 11 Metals", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 1465-1477.
- Z. Xu, L.K. Thompson, D.O. Miller, E. Ruiz, S. Alvarez, "A novel hexanuclear mixed oxidation state Cu(II)₄Cu(I)₂ complex exhibiting ferromagnetic exchange", *Inorg. Chem.*, vol. 42, 2003, pp. 1107-1111.
- D. Casanova, P. Alemany, J.M. Bofill, S. Alvarez, "Shape and Symmetry of Heptacoordinated Transition Metals: Structural Trends", *Chem. Eur. J.*, vol. 9, 2003, pp. 1281-1295.
- S. Alvarez, D. Avnir, "Continuous Chirality Measures of Tetracoordinate Bis-chelate Metal Complexes", *Dalton Trans.*, 2003, pp. 562-569.
- E. Ruiz, J. Cano, S. Alvarez, A. Caneschi, D. Gatteschi, "Theoretical Study of the Magnetic Behavior of Hexanuclear Cu(II) and Ni(II) Polysiloxanolate Complexes", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 6791-6794.
- C. Massobrio, E. Ruiz, "Localized Orbitals vs. Pseudopotential-Plane Waves Basis Sets: Performances and Accuracy for Molecular Magnetic Systems", *Monatsh. Chem.*, vol. 134, 2003, pp. 317-326.
- E. Ruiz, M. Lluell, P. Alemany, "Calculation of Exchange Coupling Constants in Solid State Transition Metal Compounds using Localized Atomic Orbital Basis Sets", *J. Solid State Chem.*, 2003.
- S. Alvarez, S. Schefzick, D. Avnir, K. Lipkowitz, "Quantitative Chirality Analysis of Molecular Sub-units of Bis(oxazoline)copper(II) Complexes in Relation to their Enantioselective Catalytic Activity", *Chem. Eur. J.*, 2003.

- C. Desplanches, E. Ruiz, S. Alvarez, “Exchange Coupling in Metal Complexes of the Second Transition Series: A Theoretical Exploration”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2003, pp. 1756-1760.
- E. Ruiz, A. Rodríguez-Forteza, S. Alvarez, “Tailor-made Strong Exchange Magnetic Coupling through Very Long Bridging Ligands: Theoretical Predictions”, *Inorg. Chem.*, vol. 42, 2003, pp. 4881-4884.
- E. Ruiz, A. Rodríguez-Forteza, J. Cano, S. Alvarez, P. Alemany, “About the Calculation of Exchange Coupling Constants in Polynuclear Transition Metal Complexes”, *J. Comput. Chem.*, vol. 24, 2003, pp. 982-989.
- R. Mas-Ballesté, G. Aullón, P.A. Champkin, W. Clegg, C. Mégret, P. González-Duarte, A. Lledós, “The Evolution of $[\{\text{Ph}_2\text{P}(\text{CH}_2)_n\text{PPh}_2\}\text{Pt}(\text{u-S})_2\text{Pt}\{\text{Ph}_2\text{P}(\text{CH}_2)_n\text{PPh}_2\}]$ ($n = 2, 3$) Metalloligands in Protic Acids: a Cascade of Sequential Reactions”, *Chem. Eur. J.*, 2003.
- J. Cirera, P. Alemany, S. Alvarez, “Mapping the Stereochemistry and Symmetry of Tetracoordinate Transition Metal Complexes”, *Chem. Eur. J.*, 2003.
- A. Rodríguez-Forteza, E. Ruiz, P. Alemany, S. Alvarez, “Magneto-structural correlations in trinuclear Cu(II) complexes: A density functional study”, *Monatsh. Chem.*, vol. 134, 2003, pp. 307-316.
- J.M. Oliva, M. Lluell, P. Alemany, E. Canadell, “Quantitative vs. qualitative approaches to the electronic structure of solids”, *J. Solid State Chem.*, 2003.
- S. Alvarez, “Poliedros y sus distorsiones en la descripción de la estructura molecular y en el diseño de edificios supramoleculares”, *An. Real Soc. Esp. Quím.*, 2003. artículo invitado, número especial centenario.
- S. Alvarez, “Relationships Between Temperature, Magnetic Moment and Continuous Symmetry Measures in Spin Crossover Complexes”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 6795-6802.
- P. Alemany, S. Alvarez, D. Avnir, “Theoretical Evidence of Persistent Chirality in D₃ Homoleptic Hexacoordinated Complexes with Monodentate Ligands”, *Chem. Eur. J.*, vol. 9, 2003, pp. 1952-1957.
- A. Rodríguez-Forteza, E. Canadell, “Localized vs. Delocalized Bonding in the K₅Bi₄ Metallic Salt”, *Inorg. Chem.*, vol. 42, 2003, pp. 2759-2763.

Dr. José M. Baldasano (UPC)

- P. Jiménez, O. Jorba, J.M. Baldasano, “Influence of horizontal model grid resolution on tropospheric ozone levels”, In 9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Garmisch-Partenkirchen, Germany, June 1-4 2004.
- P. Jiménez, J.M. Baldasano, “Ozone response to precursor controls in very complex terrains: the use of photochemical indicators to assess O₃-NO_x-VOC sensitivity in the very complex terrains”, *Journal of Geophysical Research*, 2004.
- P. Jiménez, J.M. Baldasano, “Ozone response to precursor controls: the use of photochemical indicators to assess O₃-NO_x-VOC sensitivity in the Northeastern of Iberian Peninsula”, in C.S. Zeferos, Proceedings of the XX Quadrennial Ozone Symposium QOS2004. Kos, Greece, 2004, pp. 159-160. Vol. 1.
- P. Jiménez, O. Jorba, R. Parra, C. Pérez, J.M. Baldasano, “Modeling Photochemical pollution in the northeastern Iberian Peninsula”, in Int. Tech. Meeting of NATO-CCMS on Air Pollution Modelling and its application, 2004. Accepted.
- R. Parra, P. Jiménez, J.M. Baldasano, “EMICAT2000: an air pollutants emission model for photochemical modelling research”, in J.M. Sampaio, R. Bagattini and S. Hamilton, *Actas del IX*

Seminario APEC. Pluriculturalismo y Globalización. Producción del conocimiento para la construcción de la ciudadanía en Latinoamérica, Barcelona, 2004, pp. 343-350.

- R. Parra, J.M. Baldasano, “Modelling the on-road traffic emissions from Catalonia (Spain) for photochemical air pollution research”, in C. Brebbia, Weekday-Weekend differences, Air Pollution XII. WIT Press, 2004, pp. 3-12.
- M. Sicard, C. Pérez, F. Rocadenbosch, J.M. Baldasano, A. Comerón, “Uncertainties of the gradient and the variance methods in retrieving the mixing layer height in three meteorological scenarios”, Proceedings of the 22nd International Laser Radar Conference (ILRC2004), 2004, pp. 777-780.
- R. Parra, S. Gassó, J.M. Baldasano, “Estimating the Biogenic Emissions of Non-Methane Volatile Organic Compounds of the North Western Mediterranean Vegetation (Catalonia-Spain)”, The Science of the Total Environment, no. 329, 2004, pp. 241-259.
- O. Jorba, C. Pérez, F. Rocadenbosch, J.M. Baldasano, “Cluster Analysis of 4-Day Back Trajectories Arriving in the Barcelona Area (Spain) from 1997 to 2002”, Journal of Applied Meteorology, no. 43, 2004, pp. 887-901.
- C. Pérez, M. Sicard, O. Jorba, A. Comerón, and J.M. Baldasano, “Summertime re-circulations of air pollutants over the north-eastern Iberian coast observed from systematic EARLINET Lidar measurements in Barcelona”, Atmospheric Environment, no. 38, 2004, pp. 3983-4000.
- O. Jorba, S. Gassó, J.M. Baldasano, “Regional Circulations within the Iberian Peninsula East Coast”, in C. Borrego and S. Incecik, Air Pollution Modeling and its Application XVI, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2004, pp. 453-461.
- O. Jorba, S. Gassó, J.M. Baldasano, “Regional circulations within the Iberian Peninsula east coast”, 26th Int. Tech. Meeting of NATO-CCMS on Air Pollution Modelling and its Application, Istanbul, Turkey, 26-30 May 2003.
- N. Pineda, O. Jorba, J. Jorge, J.M. Baldasano, “Using NDVI SPOT-VGT Data to update Land-use Map: Application to a Mesoscale Meteorological Model”, Journal in Remote Sensing, 2003.
- N. Barros, I. Toll, C. Soriano, P. Jiménez, C. Borrego, J.M. Baldasano, “Urban Photochemical Pollution in the Iberian Peninsula: Lisbon and Barcelona Airsheds”, Journal of the Air&Waste Management Association, no. 53, 2003, pp. 347-359.
- J.M. Baldasano, E. Valera, P. Jiménez, “Air quality data from large cities”, The Science of the Total Environment, no. 307, 2003, pp. 141-165.

Drs. Miquel Duran i Miquel Solà (UdG)

- Poater J., Fradera X., Solà M., Duran M., Simon S., “On the electron-pair nature of the Hydrogen Bond in the framework of the Atoms in Molecules Theory”, Chem. Phys. Lett., vol. 369, 2003, pp. 248-255.
- Poater J., Fradera X., Duran M., Solà M., “The Delocalization Index as an Electronic Aromaticity Criterion. Application to a Series of Planar Polycyclic Aromatic Hydrocarbons”, Chemistry-Eur. J., vol. 9, 2003, pp. 400-406.

Dr. Antonio González (UPC)

- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, “Effective Instruction Scheduling Techniques for an Interleaved Cache Clustered VLIW Processor” Proceedings of 35th International Symposium on Microarchitectures (MICRO-35) Estambul, Turquia, Novembre 2002.

- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, “An Interleaved Cache Clustered VLIW Processor” Proceedings of 26th International Conference on Supercomputing (ICS-26) New York City, Estats Units, Juny 2002.
- Josep Maria Codina, Enric Gibert, Alex Aletà, Jesús Sánchez, Antonio González, Modulo Scheduling for Clustered Processors, IAF-EMEA 2004 9th Intel EMEA Academic Forum, Barcelona, Spain, April, 2004.
- Enric Gibert, Jaume Abella, Xavier Vera, Jesús Sánchez, Antonio González, An Energy-Effective Variable-Based Multi-Module L1 Data Cache for VLIW, Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), report UPC-DAC-2004-30, 2004.
- Enric Gibert, Jaume Abella, Xavier Vera, Jesús Sánchez, Antonio González, Compilation Techniques for an Energy-Effective Multi-Module L1 Data, Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), report UPC-DAC-2004-32, 2004.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, “Flexible Compiler-Managed L0 Buffers for Clustered VLIW Processors”, 36th International Symposium on Microarchitecture (MICRO-36), San Diego, United States, December 2003, pp. 315-325.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, Effective Instruction Scheduling Techniques for an Interleaved Cache Clustered VLIW Processor, 33, Technical Report UPC-DAC, juny 2003.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, Compilation Techniques for a Word-Interleaved Cache Clustered VLIW Processor, 35, Technical Report UPC-DAC, juny 2003.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, Local Scheduling Techniques for Memory Coherence in a Clustered VLIW Processor with a Distributed Data Cache, 34, Technical Report UPC-DAC, juny 2003.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, Flexible Compiler-Managed L0 Buffers for Clustered VLIW Processors, 36, Technical Report UPC-DAC, juny 2003.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, “Local Sheduling Techniques for Memory Coherence in a Clustered VLIW Processor with a Distributed Data Cache”, Proceedings of 1st International Symposium on Code Generation and Optimization (CGO), San Francisco, Estats Units, Març 2003.
- Enric Gibert, Jesús Sánchez, Antonio González, “Compilation Techniques for a Word-Interleaved Cache Clustered VLIW Processor” Proceedings of 10th International Workshop on Compilers for Parallel Computers (CPC-2003) Amsterdam, Holanda, Gener, 2003.

Dr. Francesc Illas (UB)

- A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Illas, “Comparative theoretical study of the structure and bonding of propyne on the Pt(111) and Pd(111) surfaces”, Chem. Phys., vol. 309, 2004, pp. 33-39.
- A. Clotet, A.Valcarcel, J.M. Ricart, F. Illas, “Theoretical interpretation of the IR spectrum of propyne Cu(111)”, J. Phys. Chem. B, vol. 108, 2004, pp. 18297-18305.
- J. Carrasco, N. Lopez, F. Illas, “First principle analysis of the stability and diffusion of oxygen vacancies in metal oxides”, Phys. Rev. Lett., vol. 93, 2004, pp. 225502 (1-4).
- J.R.B. Gomes, B. Silvi, F. Illas, “Onde param os electrões?”, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, vol. 94, 2004, pp. 41-48.
- A. Del Vitto, C. Sousa, F. Illas, G. Pacchioni, “Optical properties of Cu nano-clusters supported on MgO(100)”, J. Chem. Phys., vol. 121, 2004, pp. 7457-7466.

- N. Lopez, Z. Lodziana, F. Illas, M. Salmeron, "When Langmuir is too simple: H₂ dissociation on Pd(111) at high coverage", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, 2004, pp. 146103 (1-4).
- G. Pacchioni, C. Di Valentin, D. Dominguez-Ariza, F. Illas, T. Bredow, T. Klüner, V. Staemmler, "Bonding of NH₃, CO and NO to NiO and Ni-doped MgO: a problem for DFT", *J. Phys.: Condens. Matter*, 2004, pp. S2497-S2507.
- I. García-Cruz, J.M. Martínez-Magadán, J.M. Bofill, F. Illas, "Theoretical Prediction of Benzyne-like Species in Pyrene Diradicals", *J. Phys. Chem. A*, vol. 108, 2004, pp. 5111-5116.
- C. Sousa, C. de Graaf, N. Lopez, N.M. Harrison, F. Illas, "Ab Initio Theory of Magnetic Interactions at Surfaces", *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 16, 2004, pp. S2557-S2574.
- S. González, C. Sousa, F. Illas, "Electric field effects in the chemisorption of CO on bimetallic RhCu surface models", *Surf. Sci.*, vol. 548, 2004, pp. 209-219.
- A.J. Pérez-Jiménez, J.M. Pérez-Jordá, F. Illas, "A new method to handle spin coupling in magnetic systems with localized spins", *J. Chem. Phys.*, vol. 120, 2004, pp. 18-25.
- J. Poater, I. García-Cruz, F. Illas, M. Solà, "Discrepancy between common local aromaticity measures in a series of carbazole derivatives", *Chem. Phys.*, vol. 6, 2004, pp. 314-318.
- D. Dominguez-Ariza, N. Lopez, F. Illas, G. Pacchioni, T. Madey, "Theoretical Modeling of Photon and Electron Stimulated Na and K Desorption from SiO₂", *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004, pp. 075405 (1-7).
- D. Muñoz, N.M. Harrison, F. Illas, "The electronic and magnetic structure of LaMnO₃ from hybrid periodic density functional theory", *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004, pp. 085115 (1-9).
- J. Carrasco, J.R.B. Gomes, F. Illas, "Theoretical study of bulk and surface oxygen and aluminium vacancies in corundum", *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004, pp. 064116 (1-13).
- I. Ciofini, F. Illas, C. Adamo, "Performance of the *t*-dependent functionals in predicting the magnetic coupling of ionic antiferromagnetic insulators", *J. Chem. Phys.*, vol. 120, 2004, pp. 3811-3816.
- D. Muñoz, C. de Graaf, F. Illas, "Putting error bars on the ab initio theoretical estimates of the magnetic coupling constants: the parent compounds of superconducting cuprates as a case study", *J. Comput. Chem.*, vol. 25, 2004, pp. 1234-1241.
- F. Alvarez-Ramírez, J.M. Martínez-Magadán, J.R.B. Gomes, F. Illas, "On the geometric structure of the (0001) hematite surface", *Surf. Sci.*, vol. 558, 2004, pp. 4-14.
- D. Domínguez-Ariza, C. Hartnig, C. Sousa, F. Illas, "Combining molecular dynamics and ab initio quantum-chemistry to describe electron transfer reactions in electrochemical environments", *J. Chem. Phys.*, vol. 121, 2004, pp. 1066-1073.
- N. Cruz Hernández, A. Márquez, J.F. Sanz, J.R.B. Gomes, F. Illas, "A DFT Study of Co, Rh and Ir Atoms Deposited on the α -Al₂O₃ (0001) Surface", *J. Phys. Chem. B*, vol. 108, 2004, pp. 15671-15678.
- F. Illas, I. de P.R. Moreira, J.M. Bofill, M. Filatov, "Extent and Limitations of Density Functional Theory in describing Magnetic Systems", *Phys. Rev. B*, vol. 70, 2004, pp. 132414 (1-4).
- A. Berná, A. Rodes, J.M. Feliu, F. Illas, A. Gil, A. Clotet, J.M. Ricart, "Structural and spectroelectrochemical study of carbonate and bicarbonate adsorbed on Pt(111) and Pd/Pt(111) electrodes", *J. Phys. Chem B*, vol. 108, 2004, pp. 17928-17939.
- J.M. Bofill, F. Illas, "On the evaluation of selected eigenpairs of large matrices based in function optimisation algorithms", *Mol. Phys.*, vol. 101, 2003, pp. 45-51.

- D. Domínguez-Ariza, C. Sousa, N.M. Harrison, M.V. Ganduglia-Pirovano, F. Illas, “Effect of the surface model on the theoretical description of the chemisorption of atomic hydrogen on Cu(001)”, *Surf. Sci.*, vol. 522, 2003, pp. 185-197.
- A. Markovits, J.C. Paniagua, N. Lopez, C. Minot, F. Illas, “Adsorption energy and spin state of first row transition metals adsorbed on MgO(100)”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, 2003, pp. 115417 (1-6).
- D. Ricci, G. Bano, G. Pacchioni, F. Illas, “Electronic structure of a neutral oxygen vacancy in SrTiO₃”, *Phys. Rev. B*, vol. 68, 2003, pp. 224105 (1-9).
- I. García-Cruz, J.M. Martínez-Magadán, P. Guadarrama, R. Salcedo, F. Illas, “Electronic structure properties of carbazole-like compounds: Implications for asphaltene aggregation”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 107, 2003, pp. 1597-1603.
- D. Domínguez-Ariza, F. Illas, T. Bredow, C. Di Valentin, G. Pacchioni, “The treatment of the spin coupling in the bonding of NO to the Ni-doped MgO(100) surface”, *Mol. Phys.*, vol. 101, 2003, pp. 241-247.
- J.R.B. Gomes, Z. Lodziana, F. Illas, “Adsorption of small palladium clusters on the relaxed α -Al₂O₃(0001) surface”, *J. Phys. Chem.*, vol. 107, 2003, pp. 6411-6424.
- S. Gonzalez, C. Sousa, F. Illas, “Theoretical study of the chemisorption of CO on bimetallic RhCu surfaces and nanoparticles”, *Surf. Sci.*, vol. 531, 2003, pp. 39-52.

Dr. Carles Jaime (UAB)

- P.M. Ivanov, C. Jaime, “Insights into the Structures of Large-Ring Cyclodextrins through Molecular Dynamics Simulations in Solution”, *J.Phys.Chem. B*, vol. 108(20), 2004, pp. 6261-6274.
- P.M. Ivanov, I.G. Pojarlieff, I.B. Blagoeva, C. Jaime, V. Angelova, A.H. Koedjikov, “A large gem-dimethyl effect in the cyclization of ω -phenylhydantoic acids: computational modelling of the gem-dimethyl effect on the acid- or base-catalyzed cyclization of hydantoic acids and esters”, *J.Phys.Org.Chem.*, vol. 17, 2004, pp. 423-430.
- P. Bonnet, I. Beà, C. Jaime, L. Morin-Allory, “Molecular modelling study of the 2:1 gamma-cyclodextrin: C₆₀ complex. Dummy atoms simulating bond electron distribution”, *Supramol. Chem.*, vol. 15, 2003, pp. 251-260.
- X. Grabuleda, P. Ivanov, C. Jaime, “Computational Studies on Pseudorotaxanes by Molecular Dynamics and Free Energy Perturbation Simulations”, *J.Org.Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 1539-1546.
- X. Grabuleda, P. Ivanov, C. Jaime, “Shuttling Process in [2]Rotaxanes. Modeling by Molecular Dynamics and Free Energy Perturbation Simulations”, *J.Phys. Chem.*, 2003.

Dr. Agustí Lledós (UAB)

- Ekaterina V. Bakhmutova, Vladimir I. Bakhmutov, Natalia V. Belkova, Maria Besora, Lina M. Epstein, Agustí Lledós, Georgii I. Nikonov, et al., “First Investigation of Non-Classical Dihydrogen Bonding Between an Early Transition Metal Hydride and Alcohols. IR, NMR and DFT Approach”, *Chem. Eur. J.*, vol. 10, 2004, pp. 661-671.
- Manuel G. Basallote, Maria Besora, Joaquín Durán, M. Jesús Fernández-Trujillo, Agustí Lledós, M. Angeles Mániz, Feliu Maseras, “The Effect of “Inert” Counter-anions in the Deprotonation of the Dihydrogen Complex Trans-[FeH(ζ 2-H₂)(dppe)₂]⁺: Kinetic and Theoretical Studies”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 2320-2321.

- Rubén Mas-Ballesté, Mercé Capdevila, Pilar González-Duarte, Mohamed Hamidi, Agustí Lledós, Claire Mégret, Dominique de Montauzon, “Electrochemical and Theoretical Study of the Redox Properties of Transition Metal Complexes with the {PtS₂} Core”, Dalton Transactions, 2004, pp. 706-712.
- F. Maseras, R.H. Crabtree, “[C₅H₄MeEt]Ir(PPh₃)₂]: An Agostic C-C Bond or a Close Metal-Ligand Contact?”, Inorg. Chim. Acta, vol. 357, 2004, pp. 345-346.
- D. Michael Heinekey, Agustí Lledós, José M. Lluch, “Elongated Dihydrogen Complexes. What Remains of the H-H Bond?”, Chem. Soc. Rev., vol. 33, 2004, pp. 175-182.
- Olivier Maresca, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “Computational Evaluation of Electronic and Steric Effects of Methyl Substituents in the C-H and C-S Bonds Activation of Thiophene by Cp*RhPMe₃”, New J. Chem., vol. 28, 2004, pp. 625-630.
- Konstantin Dorogov, Elise Dumont, Nam-Nhat Ho, Lyumila G. Kuzmina, Josep-Maria Poblet, Arthur J. Schultz, Judith A. K. Howard, Robert Bau, et al., “Neutron and X-ray Diffraction and DFT Studies of Asymmetric Bis(silyl) Niobocene Hydrides”, Organometallics, vol. 23, 2004, pp. 2845-2847.
- Gabriel Aullón, Mohamed Hamidi, Agustí Lledós, Santiago Alvarez, “Chalcogen-chalcogen Bonds in Edge-sharing Square-planar d₈ Complexes. Are They Possible?”, Inorg. Chem., vol. 43, 2004, pp. 3702-3714.
- Ricard Gelabert, Miquel Moreno, José M. Lluch, Agustí Lledós, V. Pons, D. Michael Heinekey, “Synthesis and Properties of Compressed Dihydride Complex of Iridium: Theoretical and Spectroscopical Investigations”, J. Am. Chem. Soc., vol. 126, 2004, pp. 8813-8822.
- Margarita Paneque, Manuel L. Poveda, Laura L. Santos, Ernesto Carmona, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Kurt Mereiter, “A Measurable Equilibrium Between Iridium Hydride-Alkene and Alkylidene Isomers”, Angew. Chem. Internat. Ed., vol. 43, 2004, pp. 3708-3711.
- Isabelle Demachy, Yves Jean, Agustí Lledós, “A Dissociative Mechanism for the Phosphines Exchange in Quadruply-Bonded Bimetallic Complexes”, New J. Chem., vol. 28, 2004, pp. 1494-1498.
- Agustí Lledós, Jorge J. Carbó, Rafael Navarro, Elena Serrano, Esteban P. Urriolabeitia, “Synthesis and Characterization of PdII Complexes with Bis-Pyridinium and Isoquinolinium N-Ylides: Moderate C-H ···O=C Intramolecular H-Bonds as Source of Conformational Preferences”, Inorg. Chem., vol. 43, 2004, pp. 7622-7635.
- Gabriel Aullón, Glòria Esquiús, Agustí Lledós, Feliu Maseras, Josefina Pons, Josep Ros, “ κ^2 vs. κ^3 Hapticity of Polydentate N-donor Ligands in [RhI (N-ligand)L₂]+ Complexes”, Organometallics, vol. 23, 2004, pp. 5530-5539.
- Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, Rubén Mas-Ballesté, “Extending the Reaction Landscape of the {Pt(i-S)₂Pt} Core: From Metal Centers to Non-Metallic Electrophiles”, Eur. J. Inorg. Chem., 2004, pp. 3585-3599.
- Galí Drudis-Solé, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “A Computational Study on the Acceleration of the Prins Reaction by Indium Trichloride”, Comptes Rendus Chimie, vol. 7, 2004, pp. 885-893.
- Rubén Mas-Ballesté, William Clegg, Agustí Lledós, Pilar González-Duarte, “A Nouvel Route to Multimetallic Nuclearity-Controlled d₈Metal-Chalcogen Ligands”, Eur. J. Inorg. Chem., 2004, pp. 3223-3227.
- Pilar Barrio, Miguel A. Esteruelas, Agustí Lledós, Enrique Oñate, Jaume Tomàs, “Influence of the Cis-Ligand on the H-H Separation and the Rotation Barrier of the Dihydrogen in Osmium-Elongated Dihydrogen Complexes Containing an Orthometalated Ketone”, Organometallics, vol. 23, 2004, pp. 3008-3015.

- N. Dölker, F. Maseras, P. E. M. Siegbahn, “Stabilization of the Adenosyl Radical in Coenzyme B12 - A Theoretical Study”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 386, 2004, pp. 174-178.
- Rubén Mas-Ballesté, Paul A. Champkin, William Clegg, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, “Unusual C-H Allylic Activation in the {PtII(cod)} Fragment Bonded to a {Pt2(μ -S)2} Core”, *Organometallics*, vol. 23, 2004, pp. 2522-2532.
- Agustí Lledós, Jorge J. Carbó, Rafael Navarro, Esteban P. Urriolabeitia, “Strong 1,4 P-O Intramolecular Interactions as a Source of Conformational Preferences in α -Stabilized Phosphorus Ylides. Part 2: Metallic Complexes”, *Inorg. Chim. Acta*, vol. 357, 2004, pp. 1444-1456.
- Miguel A. Esteruelas, Agustí Lledós, Olivier Maresca, Montserrat Oliván, Enrique Oñate, María A. Tajada, “Preparation and Full Characterization of a Tetrahydride-bis(stannyl)-osmium (VI) Derivative”, *Organometallics*, vol. 23, 2004, pp. 1453-1456.
- Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “Diradical vs. Concerted Mechanisms for the Dihydroxylation of Protoanemonin by OsO₄ and OsO₄•NH₃. The Effect of the Base in the Reaction”, *European Journal of Organic Chemistry*, 2003, pp. 833-839.
- Guada Barea, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “Theoretical Study of the Reaction Mechanism of the Uncatalyzed Epoxidation of Alkenes by Iodosylbenzene”, *New Journal of Chemistry*, vol. 27, 2003, pp. 811-817.
- Miguel A. Esteruelas, Agustí Lledós, Feliu Maseras, Montserrat Oliván, Enrique Oñate, María A. Tajada, Jaume Tomàs, “Preparation and Characterization of Osmium-Stannyl Polyhydrides: d⁴- d² Oxidative Addition of Neutral Molecules in a Late Transition Metal”, *Organometallics*, vol. 22, 2003, pp. 2087-2096.
- Natalia V. Belkova, Maria Besora, Lina M. Epstein, Agustí Lledós, Feliu Maseras, Elena S. Shubina, “Influence of Media and Homoconjugate Pairing on Transition Metal Hydride Protonation. An IR and DFT Study on Proton Transfer to CpRu(CO)(Pcy₃)”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 125, 2003, pp. 7715-7725.
- Emilio Bustelo, Jorge J. Carbó, Agustí Lledós, Kurt Mereiter, M. Carmen Puerta, Pedro Valerga, “First X-ray Characterization and Theoretical study of Chem. Commun., 2003, pp. 490-491.
- Guada Barea, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “Theoretical Assessment on the Viability of Some Possible Intermediates in the Reaction Mechanism of Catalase and Peroxidase Models”, *J.Mol.Struct.(Theochem)*, vol. 632, 2003, pp. 323-333.
- W.Y. Lo, C.H. Lam, W.K.M. Fung, H.Z. Sun, V.W.W. Yam, D. Balcells, F. Maseras, O. Eisenstein, “An Oscillating C-2(2-) Unit Inside a Koper Rectangle”, *Chem. Commun.*, 2003, pp. 1260-1261.
- J. Jaffart, M.L. Cole, M. Etienne, M. Reinhold, J.E. McGrady, F. Maseras, “C-H and C-C Agostic Interactions in Cycloalkyl Tris(pyrazolyl)Boratonium Complexes”, *Dalton Transactions*, 2003, pp. 4057-4064.
- Agustí Lledós, Marcial Moreno-Mañas, Marion Sodupe, Adelina Vallribera, Ignasi Mata, Benjamín Martínez, Elies Molins, “Bent and Linear Forms of (μ -Oxo)bis[trichloroferrate(III)] Dianion: an Intermolecular Effect - Structural, Electronic and Magnetic Properties”, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2003, pp. 4187-4194.
- Jean L.Vincent, Steven Luo, Brian L. Scott, Ray Butcher, Clifford J. Unkefer, Carol J. Burns, Gregory J. Kubas, Agustí Lledós, Feliu Maseras, J. Tomás, “Experimental and Theoretical Studies of Bonding and Oxidative Addition of Germanes and Silanes PhnEH_{4-n} (E= Si, Ge; n= 0-2) to Mo(CO)(diphosphine)₂. The First Structurally-Characterized Monometallic η^2 -Ge-H σ Complex”, *Organometallics*, vol. 22, 2003, pp. 5307-5323.
- Jacques Andrieu, Natalia V. Belkova, Maria Besora, Edmond Collange, Lina M. Epstein, Agustí Lledós, Rinaldo Poli, Pavel O. Revin, et al., “Hydrogen Bonding and Proton Transfer Involving

the Trihydride Complexes $Cp^*MH_3(dppe)$ ($M =$ molybdenum, tungsten) and Fluorinated Alcohols: The Competitive Role of the Hydride Ligands and the Metal”, Russian Chemical Bulletin, vol. 52, 2003, pp. 2679-2682.

- Rubén Mas-Ballesté, Gabriel Aullón, Paul A. Champkin, William Clegg, Claire Mégret, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, “The Evolution of $[Ph_2P(CH_2)_nPPh_2]Pt(\mu-S)_2[Ph_2P(CH_2)_nPPh_2]$ ($n = 2, 3$) Metalloligands in Protic Acids: A Cascade of Sequential Reactions”, Chem. Eur. J., vol. 9, 2003, pp. 5023-50-35.
- Isabelle Demachy, Yves Jean, Agustí Lledós, Feliu Maseras, “Electronic Against Steric Effects in Distorted Amides”, J.Mol.Struct.(Theochem), vol. 632, 2003, pp. 131-144.
- David Balcells, Galí Drudis-Solé, Maria Besora, Nicole Dölker, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “Some Critical Issues in the Application of Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Methods to the Study of Transition Metal Complexes”, Faraday Discussions, vol. 124, 2003, pp. 429-441.
- Nicole Dölker, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “A Density Functional Study on the Effect of the Trans Axial Ligand of B12 Cofactors on the Heterolytic Cleavage of the Co-C Bond”, Journal of Physical Chemistry B, vol. 107, 2003, pp. 306-315.
- Miguel A. Esteruelas, Agustí Lledós, Montserrat Oliván, Enrique Oñate, María A. Tajada, Gregori Ujaque, “Orto-CH Activation of Aromatic Ketones, Partially Fluorinated Aromatic ketones and Aromatic Imines by a Trihydride-Stannyl-Osmium (IV) Complex”, Organometallics, vol. 22, 2003, pp. 3753-3765.
- David Balcells, Feliu Maseras, Agustí Lledós, “A Density Functional Study of the Mechanism of the Vanadium-catalyzed Oxidation of Sulfides by Hydrogen Peroxide”, Journal of Organic Chemistry, vol. 68, 2003, pp. 4265-4274.

Dr. Josep Maria Lluch (UAB)

- R. Casadesús, M. Moreno, A. González-Lafont, J.M. Lluch, M.P. Repasky, “Testing electronic structure methods for describing intermolecular $H \cdots H$ interactions in supramolecular chemistry”, Journal of Computational Chemistry, vol. 25, 2004, pp. 99-105.
- X. Prat-Resina, J.M. Bofill, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Geometry optimization and transition state search in enzymes: Different options in the micro-iterative method”, International Journal of Quantum Chemistry, vol. 98, 2004, pp. 367-377.
- O. Vendrell, M. Moreno, J.M. Lluch, S. Hammes-Schiffer, “Molecular dynamics of excited state intramolecular proton transfer: 2-(2’hydroxyphenyl)- 4-methyloxazole in gas phase, solution and protein environments”, Journal of Physical Chemistry, vol. 108, 2004, pp. 6616-6623.
- D.M. Heinekey, A. Lledós, J.M. Lluch, “Elongated dihydrogen complexes: what remains of the H-H bond?”, Chemical Society Reviews, vol. 33, 2004, pp. 175-182.
- A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Rate constants of gas-phase hydrogen abstraction reactions: A balance between the association and the abstraction dynamical bottlenecks”, Journal of Molecular Structure (THEOCHEM), vol. 709, 2004, pp. 35-43.
- R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Quantum dynamics study of the excited state double-proton transfer in 2,2’-bipyridyl-3,3’-diol”, ChemPhysChem, vol. 5, 2004, pp. 1372-1378.
- O. Vendrell, M. Moreno, J.M. Lluch, “Fast hydrogen elimination from the $[Ru(PH_3)_3(CO)(H)_2]$ and $[Ru(PH_3)_4(H)_2]$ complexes in the first singlet excited states. A diabatic quantum dynamics study”, Journal of Chemical Physics, vol. 121, 2004, pp. 6258-6267.

- A. González-Lafont, M. Moreno, J.M. Lluch, “Variational transition state theory as a tool to determine kinetic selectivity in reactions involving a valley-ridge inflection point”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 126, 2004, pp. 13089-13094.
- I. Tejero, A. González - Lafont, J.M. Lluch L. A. Eriksson, “Photo-oxidation of lipids by singlet oxygen: a theoretical study”, *Chemical Physics Letters*, vol. 398, 2004, pp. 336-342.
- L. Santos, A. Vargas, M. Moreno, B. Manzano, J.M. Lluch, A. Dohual, “Ground and excited - state hydrogen - atom transfer reaction and cyclization of 2-acetylbenzoic acid”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 108, 2004, pp. 9331-9341.
- O. Vendrell, R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Photoinduced proton transfer from the green fluorescent protein chromophore to a water molecule: analysis of the transfer coordinate”, *Chemical Physics Letters*, vol. 396, 2004, pp. 202-207.
- I. Tejero, L.A. Eriksson, A. González-Lafont, J. Marquet, J.M. Lluch, “Hydrogen abstraction by soybean lipoxygenase-1. Density functional theory study on active site models in terms of Gibbs free energies”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 108, 2004, pp. 13831-13838.
- R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, A. Lledós, V. Pons, D.M. Heinekey, “Synthesis and properties of compressed dihydride complexes of iridium: Theoretical and spectroscopic investigations”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 126, 2004, pp. 8813-8822.
- M. Ochando-Pardo, I. Nebot-Gil, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Rate constants for the hydrogen abstractions in the OH-initiated oxidation of glycolaldehyde. A variational transition-state theory calculation”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 108, 2004, pp. 5117-5125.
- R. Casadesús, M. Moreno, J.M. Lluch, “Kinetic isotope effect on the photoenolization of o-methylantrone. A microcanonical transition state theory calculation”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 108, 2004, pp. 4536-4541.
- L. Torres, R. Gelabert, M. Moreno, J.M. Lluch, “Fast hydrogen elimination from the $[\text{Ru}(\text{PH}_3)_3(\text{CO})(\text{H})_2]$ complex in the first singlet excited states. A quantum dynamics study”, *Chemical Physics*, vol. 286, 2003, pp. 149-163.
- L. Masgrau, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Dependence of the rate constants on the treatment of internal rotation modes: the reaction $\text{OH} + \text{CH}_3\text{SH} \rightarrow \text{CH}_3\text{S} + \text{H}_2\text{O}$ as an example”, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 24, 2003, pp. 701-706.
- X. Prat-Resina, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “How important is the refinement of transition state structures in enzymatic reactions?”, *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, 2003.
- G. Monard, X. Prat-Resina, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Determination of enzymatic reaction pathways using QM/MM methods”, *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 93, 2003, pp. 229-244.
- L. Masgrau, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “On the curvature of the Arrhenius plots predicted by conventional canonical transition state theory in absence of tunneling”, *Theoretical Chemistry Accounts*, 2003.
- X. Prat-Resina, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “How important is the refinement of transition state structures in enzymatic reactions?”, *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, vol. 639, 2003, pp. 297-307.
- R. Casadesús, M. Moreno, J.M. Lluch, “A theoretical study of the ground and first excited singlet state proton transfer reaction in isolated 7-azaindole-water complexes”, *Chemical Physics*, vol. 290, 2003, pp. 319-336.
- L. Masgrau, A. González-Lafont, J.M. Lluch, “Variational transition-state theory rate constant calculations of the $\text{OH} + \text{CH}_3\text{SH}$ reaction and several isotopic variants”, *Journal of Physical Chemistry A*, vol. 107, 2003, pp. 4490-4496.

Dr. Juan José Novoa (UB)

- R.E. Del Sesto, A. M. Arif, J.J. Novoa, I. Anusiewicz, P. Skurski, J. Simons, B.C. Dunn, E.M. Eyring, J.S. Miller, "Chemical reduction of 2,4,6-tricyano-1,3,5-triazine and 1,3,5-tricyanobenzene. Formation of the novel 4,4',6,6'-tetracyano-2,2'-bitriazine and its radical anion", *J. Org. Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 3367-3379. Front Cover: May, 2.
- M. Deumal, M.A. Robb, J.J. Novoa, "The mechanism of the magnetic interaction in the β phase of the p-(nitro)phenyl nitronyl nitroxide (KAXHAS). A bottom-up study using only ab initio data", *Polyhedron*, vol. 22, 2003, pp. 1935.
- J. Ribas-Ariño, J.J. Novoa, "The origin of the magnetic moments in pressed polymeric-C60 crystals", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 2003.
- Juan J. Novoa, Pilar Lafuente, Mercè Deumal, Fernando Mota, Theoretical Study of the Electronic Structure and Magnetic Interactions in Purely Organic Nitronyl Nitroxide Crystals, J. S. Miller and M. Drillon, *Magnetism: Molecules to Materials IV*, Wiley-VCH, Weinheim, 2003.
- A. Bottoni, G.P. Miscione, J.J. Novoa, X. Prat, "A DFT Computational Study of the Mechanism of Allyl Halides Carbonylation Catalyzed by Nickel Tetracarbonyl", *J. Am. Chem. Soc.*, 2003.
- I. Ratera, D. Ruiz-Molina, J. Vidal-Gancedo, J.J. Novoa, K. Wurst, J.F. Letard, C. Rovira, J. Veciana, "Supramolecular Photomagnetic Materials: Photoinduced Self-Assembly of Ferrocene-Based Polychlorotriphenylmethyl Radicals", *Chem. Eur. J.*, 2003.
- M. Deumal, C.P. Landee, J.J. Novoa, M.A. Robb, M.M. Turnbull, "Through space magnetic exchange in tetrabromocuprates: theoretical considerations", *Polyhedron*, vol. 22, 2003, pp. 2235.
- M. Deumal, M.A. Robb, J.J. Novoa, Ab initio study of the magnetic properties of purely organic molecular crystals, R. Carbó, *Mathematical and Computational Chemistry*, Kluwer-Academic, New York, 2003.

Dr. Santiago Olivella (CSIC)

- M. Torrent-Sucarrat, J. Anglada, "The Gas-Phase Hydrogen Bond Complexes between Formic Acid with Hydroxyl Radical: A Theoretical Study", *Chem. Phys. Chem.*, vol. 5, 2004, pp. 183-191.
- S. Olivella, J.M. Anglada, A. Solé, J.M. Bofill, "Mechanism of the Hydrogen Transfer from the OH Group to Oxygen-Centered Radicals: Proton-Coupled Electron-Transfer versus Radical Hydrogen Abstraction", *Chem. Eur. J.*, vol. 10, 2004, pp. 3404-3410.
- S. Olivella, A. Solé, "Unimolecular Decomposition of β -Hydroxyethylperoxy Radicals in the HO \cdot -initiated Oxidation of Ethene: A theoretical Study", *J. Phys. Chem.*, vol. 108, 2004, pp. 11651-11663.
- J.M. Anglada, "Complex Mechanism of the Gas Phase Reactions between Formic Acid and Hydroxyl Radical. Proton Coupled Electron Transfer versus Radical Hydrogen Abstraction Mechanisms", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 9809-9820.
- S. Olivella, A. Solé, "Mechanism of 1,3-Migration in Allylperoxyl Radicals: Computational evidence for the Formation of a Loosely Bound Radical-Dioxygen Complex", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 10641-10650.
- P. Aplincourt, J.M. Anglada, "Theoretical Studies on the Isoprene Ozonolysis under Tropospheric Conditions. 1. Reaction of Substituted Carbonyl Oxides with Water", *J. Phys. Chem. A*, vol. 107, 2003, pp. 5798-5811.

- P. Aplincourt, J.M. Anglada, “Anglada Theoretical Studies on the Isoprene Ozonolysis under Tropospheric Conditions. 2. Unimolecular and Water-Assisted Decomposition of the O-Hydroxy-Hydroperoxides”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 107, 2003, pp. 5812-5820.
- Anabel Cosp, Igor Larrosa, Josep M. Anglada, Josep M. Bofill, Pedro Romea and Fèlix Urpí, “Studies on the Intramolecular C-H \cdots X (X=O, S) Interactions in (S)-N-Acyl-4-isopropyl-1,3-thiazolidine-2-thiones and Related 1,3-Oxazolidin-2-ones”, *Organic Letters*, vol. 5, 2003, pp. 2809-2812.

Dr. Pablo Jesús Ordejón (CSIC)

- J.L. Mozos, P. Ordejón, M. Brandbyge, J. Taylor, K. Stokbro, “Density functional theory calculations of quantum electron transport: carbon nanotubes-gold contacts”, *Advances in Quantum Chemistry*, vol. 42, 2003, pp. 299.
- E. Hernández, P. Ordejón, E. Canadell, J. Junquera, J.M. Soler, Molecular Dynamics Simulations of Nanotube Growth, L. M. Liz-Marzan and M. Giersi, *Proceedings of the NATO ARW on Low dimensional systems: theory, preparation and some applications*, Poznan, 2003, ISBN1-4020-1168-7.
- S. Reich, C. Thomsen, P. Ordejón, “Elastic properties and pressure induced phase transitions in single-walled carbon nanotubes”, *Phys. Stat. Sol. (b)*, vol. 235, 2003, pp. 354.
- A. Segura, F.J. Manjón, D. Errandonea, J. Pellicer-Porres, V. Muñoz, G. Tobias, P. Ordejón, E. Canadell, A. San Miguel, D. Sánchez-Portal, “Specific features of the electronic structure of III-VI layered semiconductors: recent results on structural and optical measurements under pressure and electronic structure calculations”, *Phys. Stat. Sol. (b)*, vol. 235, 2003, pp. 267.
- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón, “First principles studies of neutral vacancies diffusion in SiC”, *Comput. Mat. Sci.*, vol. 27, 2003, pp. 36.
- R. Rurali, P. Godignon, J. Rebollo, E. Hernández, P. Ordejón, “First-principles study of n-type dopants and their clustering in SiC”, *Applied Phys. Lett.*, vol. 82, 2003, pp. 4298.
- S. Reich, C. Thomsen, P. Ordejón, “Elastic properties of carbon nanotubes under hydrostatic pressure”, *Phys. Rev. B*, vol. 65, 2003. 15340.
- E. Artacho, M. Machado, D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, J. Soler, “Electrons in Dry DNA from Density Functional Calculations”, *Molecular Physics*, vol. 101, 2003, pp. 1587.
- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón, “First principles studies of N and P dopant interactions in SiC: implications for co-doping”, *Material Science Forum*, vol. 433-436, 2003, pp. 649.
- Y.J. Lee, R.M. Nieminen, P. Ordejón, E. Canadell, “First-principles characterization of the electronic structure of the molecular superconductor β -(BEDT-TTF) $_2$ IbBr $_2$ ”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, 2003, pp. 180505(R).
- J. Junquera, M. Zimmer, P. Ordejón, P. Ghosez, “First-principles calculation of the band offset at BaO/BaTiO $_3$ and SrO/SrTiO $_3$ interfaces”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, 2003, pp. 155327.
- K. Stokbro, J. Taylor, M. Brandbyge, J.L. Mozo, P. Ordejón, “Theoretical study of the non-linear conductance of di-thiol benzene coupled to Au(111) surfaces via thiol and thiolate bonds”, *Comp. Mat. Sci.*, vol. 27, 2003, pp. 151.

Dr. Modesto Orozco (UB)

- M. Orozco, E. Cubero, X. Barril, C. Colominas, F.J. Luque, *Nucleic Acid Bases in Solution*, J. Leszczynski, *Computational Molecular Biology*, 8, Elsevier Science, pp. 119-116 Chapter 4.

- X. Fradera, M. de Rosa, M. Orozco, F.J. Luque, "Tautomeric conjugate acids of aminopyrroles: Effect of substituents, solvation and co-solute", *Theor. Chem. Acc.*, vol. 111, 2004, pp. 223-230.
- M. Orozco, M. Rueda, J.R. Blas, E. Cubero, F.J. Luque, C.A. Laughton, "Molecular dynamics simulation of nucleic acids", *Encyclopedia of Computational Chemistry*, vol. 87, 2004, pp. 800-811.
- J.R. Blas, F.J. Luque, M. Orozco, "Unique tautomeric properties of isoguanine", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 154-164.
- A. Valenzuela, D. Talavera, M. Orozco, X. de la Cruz, "Alternative splicing and the modulation of protein function among species", *J. Mol. Biol.*, vol. 335, 2004, pp. 495-502.
- I. Soteras, A. Morreale, J.M. López-Bes, M. Orozco, F.J. Luque, "Group contributions to the solvation free energy from MST continuum calculations", *Braz. J. Phys.*, vol. 34, 2004, pp. 48-57.
- R. Estévez, M. Pusch, C. Ferrer, M. Orozco, T.J. Jentsch, "Functional and structural conservation of CBS domains from CLC channels", *J. Physiology*, vol. 557, 2004, pp. 363-378.
- J.L. Marco, C. de los Rios, A.G. Garcia, M. Villarroya, M.C. Carreiras, C. Martins, A. Eletéiro, A. Morreale, M. Orozco, F.J. Luque, "Synthesis, biological evaluation and molecular modelling of diversely functionalized heterocyclic {Pyrano[3,2]-pyridine, Pyrano[2,3b]quinoline, [1,8]Naphthyridines, Oxazolo[4,5-e] pyridine and Oxazolo[5,4-b]quinoline} derivatives as Acetylcholinesterase and Butyrylcholinesterase Inhibitors", *Bioorg. Med. Chem.*, vol. 12, 2004, pp. 2199-2218.
- A. Morreale, X. De la Cruz, T. Meyer, J.L. Gelpí, F.J. Luque, M. Orozco, "Linear Response Theory: An alternative to MM/PB and GB/SA methods for the analysis of molecular dynamics trajectories?", *Proteins*, vol. 57, 2004, pp. 458-467.
- E.J. Stollar, J.L. Gelpí, S. Velankar, A. Golovin, M. Orozco, B. F. Luisi, "An unconventional water-tryptophan interaction in protein structures", *Proteins*, vol. 57, 2004, pp. 1-8.
- A. Pérez, A. Noy, F. Lankas, F.J. Luque, M. Orozco, "The relative flexibility of DNA and RNA: Database analysis", *Nucleic Acids Res.*, vol. 32, 2004, pp. 6144-6151.
- N. Spackova, E. Cubero, J. Sponer, M. Orozco, "Theoretical study of the guanine-->6-thioguanine substitution in duplexes, triplexes and tetraplexes", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 14642-14650.
- A. Noy, A. Pérez, P. Lankas, F.J. Luque, M. Orozco, "The relative flexibility of DNA and RNA: A molecular dynamics study", *J. Mol. Biol.*, vol. 343, 2004, pp. 627-638.
- J. Muñoz-Muriedas, J.M. López, M. Orozco, F.J. Luque, "Molecular Modeling Approaches to the Design of Acetylcholinesterase Inhibitors: New Challenges for the Treatment of Alzheimer's Disease", *Current. Pharm. Des.*, vol. 10, 2004, pp. 3131-3140.
- L. Martí, A. Abella, X. de la Cruz, S. García-Vicente, M. Unzeta, C. Carpené, M. Palacín, X. Testar, M. Orozco, A. Zorzano, "Exploring the binding mode of semicarbazide-sensitive amine oxidase/VAP-1: Identification of novel substrates with Insuline-like activity", *J. Med. Chem.*, vol. 47, 2004, pp. 4865-4874.
- M. Rueda, E. Cubero, C.A. Laughton, M. Orozco, "Exploring the counterion atmosphere around DNA. What can be learnt from molecular dynamics simulations?", *Biophys. J.*, vol. 87, 2004, pp. 800-811.
- C. Ferrer-Costa, M. Orozco, X. de la Cruz, "Prediction of pathological mutations with neural networks using séquence information only", *Proteins*, vol. 57, 2004, pp. 458-467.
- I. Gómez-Pinto, E. Cubero, S.G. Kalko, V. Monaco, G. Van der Marel, J.H. van Boom, M. Orozco, C. González, "Effect of bulky lesions on DNA: Solution structure of a DNA duplex containing a cholesterol adduct", *J. Biol. Chem.*, vol. 279, 2004, pp. 24552-24560.

- F.J. Luque, A. Bidon-Chanal, J. Muñoz-Muriedas, I. Soteras, C. Curutchet, A. Morreale, M. Orozco, "Solute-solvent interactions from QM SCRF methods. Analysis of Group Contributions to Solvation", in E. Brandas, E.Kryachko, In *Fundamental World of Quantum Chemistry. A tribute to the memory of Per-Olov Lowding*, Kluwer, 2004, pp. 475-495. vol. 3.
- C. Curutchet, A. Bidon-Chanal, M. Orozco, F.J. Luque, "MST study of group contributions for alkane derivatives: Effect of the charge normalization", *Chem. Phys. Lett.*, vol. 384, 2004, pp. 299-305.
- R. Estévez, M. Pusch, C. Ferrer-Costa, M. Orozco, T.J. Jentsch, "Functional and Structural Conservation of CBS domains for CIC Channels", *J. Gen. Physiol.*, vol. 122, 2004, pp. 14.
- R. Goñi, X. de la Cruz, M. Orozco, "Triplex target sequences in the human genome", *Nuc. Acid. Res.*, vol. 32, 2004, pp. 354-360.
- E. Cubero, F.J. Luque, M. Orozco, J. Gao, "A perturbational approach to combined QM/MM simulation of Solute-Solvent Interactions in Solution", *J. Phys. Chem.*, vol. 107, 2003, pp. 1664-1671.
- C. Curutchet, J.M. Bofill, B. Hernández, M. Orozco, F.J. Luque, "Energy decomposition in molecular complexes. Implication for the treatment of polarization in molecular simulations", *J. Comp. Chem.*, vol. 10, 2003, pp. 1263-1275.
- N. Escaja, E. Pedroso, J.L. Gelpí, M. Orozco, M. Rico, C. González, "A four-stranded DNA structure stabilized by a novel G:C:A:T tetrad", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 5654-5662.
- A. Morreale, J.L. Gelpí, F.J. Luque, M. Orozco, "Continuum and discrete calculation of fractional contributions to solvation free energy", *J. Comp. Chem.*, 2003.
- M. Orozco, A. Pérez, A. Noy, F.J. Luque, "Theoretical methods for the simulation of nucleic acids", *Chem. Soc. Rev.*, 2003.
- A. Aviño, M. Frieden, J.C. Morales, B.G. de la Torre, R. Güimil-García, M. Orozco, C. González, R. Eritja, "Properties of triple helices formed by oligonucleotides containing 8-aminopurines", *Nucleosides and Nucleotides*, vol. 22, 2003, pp. 639-642.
- X. Fradera, M. Márquez, B. Smith, M. Orozco, F.J. Luque, "Molecular Dynamics Study of [2]rotaxanes: Influence of solvation and cation on co-conformation", *J. Org. Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 4663-4673.
- M. Rueda, S. Kalko, F.J. Luque, M. Orozco, "The structure and dynamics of DNA in the gas phase", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 8007-8014.
- X. Fradera, M. de Rosa, M. Orozco, F.J. Luque, "Tautomeric conjugate acids of aminopyrroles: Effect of substituents, solvation and co-solute", *Theor. Chem. Acc.*, 2003. I.
- R. Soliva, C. Almansa, S.G. Kalko, F.J. Luque, M. Orozco, "Theoretical studies on the inhibition mechanism of COX-2. Is there an unique recognition site?", *J. Med. Chem.*, vol. 46, 2003, pp. 2372-1382.

Dr. Leonardo Pardo (UAB)

- G. Smits, M. Campillo, C. Govaerts, V. Janssens, C. Richter, G. Vassart, L. Pardo, S. Costagliola, "Glycoprotein hormone receptors: determinants in leucine-rich repeats responsible for ligand specificity", *EMBO J*, vol. 22, 2003, pp. 2692-2703.
- M.L. López-Rodríguez, M.J. Morcillo, E. Fernández, B. Benhamú, I. Tejada, D. Ayala, A. Viso, M. Olivella, L. Pardo, M. Delgado, J. Manzanares, J.A. Fu, "Design and synthesis of S-(-)-2-[[4-(naphth-1-yl)piperazin-1-yl]methyl]-1,4-dioxoperhydropyrrolo[1,2-a]pyrazine (CSP-2503) using

computational simulation. A 5-HT_{1A} receptor agonist”, *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, vol. 13, 2003, pp. 1429-1432.

- C. Govaerts, A. Bondue, J.Y. Springael, M. Olivella, X. Deupi, E. Le Poul, S.J. Wodak, M. Parmentier, L. Pardo, C. Blanpain, “Activation of CCR5 by chemokines involve an aromatic cluster between transmembrane helices 2 and 3”, *J. Biol. Chem.*, vol. 278, 2003, pp. 1892-1903.
- A. Pujol, I. Boiso, J. Benet, A. Veiga, M. Durban, M. Campillo, J. Egozcue, J. Navarro, “Analysis of nine chromosome probes in first polar bodies and metaphase II oocytes for the detection of aneuploidies”, *Eur. J. Hum. Genet.*, vol. 11, 2003, pp. 325-336.
- D. Bosch, M. Campillo, L. Pardo, “Binding of proteins to the minor groove of DNA: what are the structural and energetic determinants for kinking a basepair step?”, *J. Comput. Chem.*, vol. 24, 2003, pp. 682-691.

Dr. Juan Jesús Pérez (UPC)

- M. Pinto, J.J. Perez, J. Rubio-Martinez, “Molecular dynamics study of different peptide segments of the BH3 domain of the proapoptotic proteins Bak, Bax, Bid and Hrk bound to the Bcl-xl and Bcl-2 proteins”, *J. Comp.-Aided Mol. Design*, 2003.
- K. Bisetty, J. Gomez-Catalan, C. Aleman, E. Giralt, H. G. Kruger, J.J. Perez, “A conformational study of the (R)-8-amino-pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0.3,10.0.5,9] undecane-8-carboxylic acid dipeptide”, *J. Pept. Sci.*, 2003.
- J. Casanovas, A.I. Jiménez, C. Cativiela, J.J. Pérez, C. Alemán, “N-acetyl-N'-dimethylamide derivative of (2S,3S)-1-amino-2,3-diphenylcyclopropanecarboxylic acid: theoretical analysis of the conformational impact produced by the incorporation of the second phenyl group to the cyclopropane analogue of phenylalanine”, *J. Org. Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 7088-7091.
- J. Canto, I. Haro, M.A. Alsina, J.J. Perez, “Analysis of the differential conformational behavior of two antigens of the hepatitis a virus through molecular dynamics and surface activity measurements”, *J. Phys. Chem.*, vol. B107, 2003, pp. 6603-6608.

Dr. Josep Manel Ricart (URV)

- A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Delbecq, P. Sautet, “Comparative DFT study of the adsorption of 1,3-butadiene, 1-butene and 2-cis/trans-butenes on the Pt(111) and Pd(111) surfaces”, *Surface Science*, vol. 549, 2004, pp. 121-133.
- A. Ample, J.M. Ricart, A. Clotet, D. Curulla, J.W. Niemantsverdriet, “Competitive CN and N₂ formation on Rh(111): a case of entropic stabilization”, *Chemical Physics Letters*, vol. 385, 2004, pp. 52-54.
- J.F. Paul, J. Pèrez-Ramírez, F. Ample, J.M. Ricart, “Theoretical Studies of N₂O Adsorption and Reactivity to N₂ and NO on Rh(111)”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 108, 2004, pp. 17921-17927.
- A. Ample, A. Clotet, J.M. Ricart, “Structure and bonding mechanism of cyanide adsorbed on Pt(111)”, *Surface Science*, vol. 558, 2004, pp. 111-121.
- A. Valcárcel, A. Gil, J.M. Ricart, A. Clotet, “Theoretical study of propene adsorbed on sulphated Pt(111)”, *Chemical Physics Letters*, vol. 339, 2004, pp. 295-299.

- A. Valcárcel, J.M. Ricart, F. Illas, A. Clotet, “Theoretical Interpretation of the IR Spectrum of Propyne on Cu(111)”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 108, 2004, pp. 18297-18305.
- A. Berná, A. Rodes, J.M. Feliu, F. Illas, A. Gil, A. Clotet, J.M. Ricart, “Structural and Spectro-electrochemical Study of Carbonate and Bicarbonate Adsorbed on Pt(111) and Pd/Pt(111) Electrodes”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol. 108, 2004, pp. 18297-18305.
- A. Gil, A. Clotet, J.M. Ricart, G. Kresse, M. García-Hernández, N. Rosch, P. Sautet, “Site preference of CO chemisorbed on Pt(111) from density functional calculations”, *Surface Science*, vol. 530, 2003, pp. 71.
- G. Kresse, A. Gil, P. Sautet, “Significance of single-electron energies for the description of CO on Pt(111)”, *Physical Review B*, vol. 68, 2003, pp. 073401.

Dra. Mariona Sodupe (UAB)

- S. Simon, M. Sodupe, J. Bertrán, “Water catalyzed isomerization of glycine radical cation. From hydrogen atom transport to proton transport catalysis”, *Theor. Chem. Acc.*, vol. 111, 2004, pp. 217.
- M. Noguera, J. Bertrán, M. Sodupe, “A quantum Chemical study of Cu²⁺ interacting with Guanine-Cytosine Base pair. Electrostatic and Oxidative Effects on Intermolecular Proton transfer processes”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 108, 2004, pp. 333.
- X. Solans-Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe, C. Zicovich-Wilson, E. Gribov, G. Spoto, C. Busco, P. Ugliengo, “Can Cu⁺-exchanged Zeolites Store Molecular Hydrogen? An Ab-initio Periodic Study Compared with Low Temperature FTIR”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 108, 2004, pp. 8278.
- M. Noguera, J. Bertrán, M. Sodupe, “A quantum Chemical study of Cu²⁺ interacting with Guanine-Cytosine Base pair. Electrostatic and Oxidative Effects on Intermolecular Proton transfer processes”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 108, 2004, pp. 333.
- M. Noguera, M. Sodupe, J. Bertrán, “Effects of protonation on proton transfer processes in Guanine-Cytosine Watson-Crick base pair”, *Theor. Chem. Acc.*, vol. 112, 2004, pp. 318.
- Ll. Blancafort, J. Bertrán, M. Sodupe, “Triplet (π, π^*) Reactivity of the Guanine-Cytosine DNA Base Pair: Benign Deactivation versus Double Tautomerization via Intermolecular Hydrogen Transfer”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 126, 2004, pp. 12770.
- J.E. Sponer, P.J. Sanz Miguel, L. Rodríguez-Santiago, A. Erxleben, M. Krumm, M. Sodupe, J. Sponer, B. Lippert, “Metal mediated Deamination of Cytosine. Experiment and DFT calculations”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 43, 2004, pp. 5396.
- V. Branchadell, C. Crévisy, R. Grée, “From Allylic Alcohols to Aldols Using Iron Carbonyls as Catalysts: Computational Study on a Novel Tandem Isomerization-Aldolization Reaction”, *Chem. Eur. J.*, vol. 10, 2004, pp. 5795.
- E. García-Expósito, Ángel Álvarez-Larena, V. Branchadell, R.M. Ortuño, “[2+2] Photocycloaddition of 1,1-Diethoxyethylene to Chiral Polyfunctional 2-Cyclohexenones. Regioselectivity and π -Facial Discrimination”, *J. Org. Chem.*, vol. 69, 2004, pp. 1120.
- X. Solans-Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe, M. Sierka, J. Sauer, “Electron hole formation in acidic zeolite catalysts”, *J. Chem. Phys.*, vol. 121, 2004, pp. 6034.
- A. Gil, M. Sodupe, J. Bertrán, “Unusual hydrogen bonds in [AH₃-H₃O]⁺ radical cations (A = C, Si, Ge, Sn and Pb) Single-electron hydrogen bond, proton-hydride hydrogen bond and formation of [H₂AOH₂]⁺ -H₂ complexes”, *Phys. Lett.*, vol. 395, 2004, pp. 27.

- J. Poater, M. Solà, A. Rimola, L. Rodríguez Santiago, M. Sodupe, “Ground and low lying electronic states of $\text{Cu}_2^+-\text{H}_2\text{O}$. A difficult case for density functional methods”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 108, 2004, pp. 6072.
- X. Solans, M. Sodupe, V. Branchadell, “Spin-forbidden N_2O dissociation in Cu-ZSM-5”, *Chemical Physics Letters*, vol. 368, 2003, pp. 242.
- V. Branchadell, C. Crévisy, R. Grée, “Theoretical Study on the Mechanism of Iron Carbonyls Mediated Isomerization of Allylic Alcohols to Saturated Carbonyls”, *Chem. Eur. J.*, vol. 9, 2003, pp. 2062.
- A. Gil, M. Sodupe, J. Bertrán, “Gas phase dissociation energies of Saturated AH_n^+ Radical cations and AH_n neutrals ($A = \text{Li-F, Na-Cl}$). dehydrogenation, deprotonation and formation of $\text{AH}_n-2^+-\text{H}_2$ complexes”, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 7461.
- S. Torrente, B. Noya, V. Branchadell, R. Alonso, “Intra- and Intermolecular 1,3-Dipolar Cycloaddition of Sugar Ketonitrone with Mono- Di-, and Trisubstituted Dipolarophiles”, *J. Org. Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 4772-4783.
- L. Rodríguez-Santiago, M. Noguera, M. Sodupe, J.Y. Salpin, J. Tortajada, “Reactivity of Ni^+ with Urea. Mass Spectrometry and Theoretical Studies”, *J. Phys. Chem. A*, vol. 107, 2003, pp. 9865.
- J. Bertrán, M. Noguera, M. Sodupe, “Effects of ionization and cationization on intermolecular proton transfer reactions in DNA base pairs”, *Fundamental aspects in Quantum Chemistry. A tribute volume to P. O. Lowdin*, vol. II, 2003, pp. 557.
- S. Simon, M. Sodupe, J. Bertrán, “Solvent catalyzed isomerization of glycine radical cation. From hydrogen transfer to proton transport catalysis”, *Ther. Chem. Acc.*, 2003.
- E. Muray, O. Illa, J.A. Castillo, A. Alvarez-Larena, J.L. Bourdelande, V. Branchadell, R.M. Ortuño, “Photolysis of Chiral 1-Pyrazolines to Cyclopropanes: Mechanism and Stereospecificity”, *J. Org. Chem.*, vol. 68, 2003, pp. 4906.
- M. Roca, S. Martí, J. Andres, V. Moliner, I. Tunon, J. Bertrán, I. Williams, “Theoretical Modeling of Enzyme Catalytic Power: Analysis of “, *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 125, 2003, pp. 772.

Dr. Mateo Valero (UPC)

- Esther Salami, Mateo Valero, Initial Evaluation of Multimedia Extensions on VLIW Architectures. In Fourth International Workshop on Systems, Architectures, Modeling and Simulation (SAMOS IV), Springer-Verlag, July 2004. vol. 3133, pp. 403-412.

Dr. Eudald Vilaseca (UB)

- E. Companys, J. Puy, M. Torrent, J. Galceran, J. Salvador, J.L. Garcés, F. Mas, “Binding curve from normalised limiting currents of labile heterogeneous metal-macromolecular systems. The case of Cd/humic acid”, *Electroanalysis*, vol. 15, 2003, pp. 452-459.

Dr. Jordi Villa (UPF)

- Brea J., Masaguer C.F., Villazon M., Cadavid M.I., Ravina E., Fontaine F., Dezi C., Pastor M., Sanz F., Loza M.I., “Conformationally constrained butyrophenones as new pharmacological tools to

study 5-HT_{2A} and 5-HT_{2C} receptor behaviours”, Eur J Med Chem., vol. 38, no. 4, 2003, pp. 433-40.

- Fontaine F., Pastor M., Gutiérrez-de-Terán H., Lozano J.J., Sanz F., “Use of alignment-free molecular descriptors in diversity analysis and optimal sampling of molecular libraries”, Mol Divers, 2003.
- Gutiérrez-de-Terán H., Centeno N.B., Pastor M., Sanz F., “Novel approaches for modeling of the A1 adenosine receptor and its agonist binding site”, Proteins, 2003.
- Barbany M., Gutierrez-De-Teran H, Sanz F, Villa-Freixa J, Warshel A, “On the generation of catalytic antibodies by transition state analogues”, ChemBioChem, vol. 4, no. 4, 2003, pp. 277-85.

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

	2000	2001	2002	2003	2004	Acumulat
Per institució						
UB	108	111	88	61	63	824
UAB	29	39	33	35	51	338
UPC	44	40	13	26	32	524
UPF	5	1	2	4		27
UdG	7	2	3	2		67
UdL	1	1	6	1	7	48
URV	4	3	7	2	7	55
CSIC	22	18	31	16	4	287
UIB	6	10	13	13		82
Altres	16	26	15	24	4	304
Per tipus de publicació						
<i>Proceedings</i>						10
<i>In proceedings</i>	8	16	4	3	11	143
Articles	218	224	192	169	153	2.129
Llibres	1				1	42
Reports tècnics	2	2	1	4	2	62
Altres publicacions	13	9	14	8	1	170
Total	242	251	211	184	168	2.556

Annex V:

Els visitants dels programes de mobilitat

Aquest annex recull els 32 visitants del programa de mobilitat per al CESCA-CEPBA, distribuïts per àrea de coneixement, que enguany han usat hores computacionals. D'aquests visitants, 7 van realitzar la seva estada a la fi del 2003 però encara van disposar de quatre mesos per finalitzar els càlculs, com estableix el programa. Dels 25 que han realitzat la seva estada el 2004, un va venir amb el programa IHP al començament de l'any, mentre que els 24 restants han estat convidats amb el nou programa HPC.

Física

Jordi García Ojalvo	<i>Pattern formation and synchronisation in systems of coupled oscillators with heterogeneous external stimulation</i>	
Física i Enginyeria Nuclear		
UPC	Andreas Bohn	DE
	TU Darmstadt	
	12-10-04 / 21-12-04 (128 SGI)	HPC
	<i>Monte-Carlo simulation of finicials bosons</i>	
	Linas Galvanauskas	LT
	Vilnius University	
	12-9-04 / 25-9-04	
	13-10-04 / 8-11-04	
	22-11-04 / 19-12-04 (1 SGI)	HPC

Química teòrica

Carme Rovira	<i>Car-Parrinello Simulations on Protein Channels</i>	
Centre de Recerca en Química Teòrica	Morten O. Jensen	DK
UB	Technical University of Denmark	
	(46.939 SP3)	IHP
Francesc Illas	<i>Structure and reactivity of point defects on the hydroxylated alpha-Al₂O₃(0001) surface</i>	
Dept. Química Física & CeRQT		
UB	Jose Richard Baptista Gomes	PT
	Universidade do Porto	
	1-7-04 / 1-8-04 (1.862 CPQ)	HPC
	<i>Exploring the low energy landscape of silicon-dioxide clusters</i>	
	Edwin FliFlikkema	NL
	Technical University of Delft	
	12-11-04 / 24-12-04	
	27-12-04 / 4-2-05 (177 CPQ)	HPC

	<i>Large-scale modeling of point defects in advanced perovskites</i>	
	Yuri Mastrikov	LT
	Latvian University	
	15-9-04 / 15-12-04 (15.942 SP3)	HPC
	<i>Ab initio simulation of NOx reactivity on Calcium Oxide</i>	
	Cristiana di Valentin	IT
	Universita di Milano-Bicocca	
	28-06-04 / 22-7-04 (13.528 SP3)	HPC
	<i>Theoretical Study of the Geometrial and Electronic Structure of Point Defects in Oxide Surfaces</i>	
	Annalisa del Vitto	IT
	University of Milano-Bicocca	
	1-9-04 / 15-10-04 (413 CPQ, 3 SGI)	IHP
Margarita Albertí	<i>Parallelization models for n-body problems</i>	
Dept. de Química Física	Leonardo Pacifici	IT
UB	Università di Perugia	
	4-9-04 / 13-11-04 (82 CPQ, 5 HP)	HPC
Santiago Álvarez	<i>Theoretical Study of the Photomagnetic Molecule</i>	
Dept. de Química Inorgànica	$\{[Mo(CN)_2][\mu-CN)_6Cu(C_6N_4H_{18})]_6\}^{8+}$	
UB	Juan M. Herrera	FR
	Université Pierre et Marie Curie	
	(1 HP)	IHP
Miguel González	<i>Quantum dynamics study on tetra-atomic system</i>	
Dept. de Química Física	Pablo Defazio	IT
UB	Siena University	
	24-4-04 / 12-6-04 (133 GS)	HPC
Juan José Novoa	<i>Mechanism of the magnetic interaction in through-space low-dimensional tetrabromo cuprates magnetic crystals</i>	
Dept. de Química Física	Giacomo Giorgi	IT
UB	Università di Perugia	
	24-10-04 / 21-12-04 (7.121 SP3)	HPC
Francesc Sagués	<i>A multilevel approach for the study of self-organization phenomena in soft-matter systems</i>	
Dept. de Química Física	Enrique Abad	ES
UB	n/a	
	30-5-04 / 29-8-04	HPC

Santiago Álvarez Dept. de Química Inorgànica UB	<i>Theoretical Study of Exchange Coupling between Transition Metal Atoms through Nanotubes</i> Francesca Nunzi Università di Perugia 1-9-04 / 15-10-04 (2.997 HP, 7.732 SP3)	IT HPC
Agustí Lledós Dept. Química UAB	<i>Prismatic trigonal, an alternative to octahedral</i> Herve Lesnard Université de Paris-Sud 5-7-04 / 29-7-04 (2.699 CPQ, 3 HP)	FR HPC
Mariona Sodupe Dept. Química UAB	Piero Ugliengo University of Torino 1-9-04 / 27-11-04 (4.324 CPQ, 2.955 HP, 2.437 SGI, 10.504 GS, 1.118 SP3)	IT HPC
Miquel Duran Institut de Química Computacional UdG	<i>Computational Photochemistry using the MMVB method</i> Michael Bearpark Imperial College London 24-8-04 / 2-9-04 (190 CPQ)	GB HPC
	<i>Molecular Energy Decomposition for "Fuzzy" Atoms</i> Istvan Mayer Hungarian Academy of Science (367 CPQ)	HU IHP
Miquel Solà Institut de Química Computacional UdG	<i>Theoretical Polar Organometallic Chemistry</i> F. Matthias Bickelhaupt Vrije Universiteit (6.803 CPQ)	NL IHP
Josep Manel Ricart Dept. de Química Física i Inorgànica URV	<i>Is HCN Formation Structure Sensitive on RH Surfaces?</i> Daniel Curulla Technische Universiteit Eindhoven (508 CPQ)	NL IHP
Enric Canadell ICMAB CSIC	<i>First principles simulations of heterogenous catalysis processes</i> Benoit Braida Université Paris VI 28-8-04 / 28-9-04 (1.126 CPQ, 742 SP3)	FR HPC

Ramon Carbonell	<i>3-D anisotropic model of seismic velocities in the upper Crust</i>	
IJA	Jiri Malek	CS
CSIC	n/a	
	14-06-04 / 15-08-04	HPC

Modelització biomolecular

Modesto Orozco	<i>Accurate quantum chemical calculation on platinum coordination to DNA bases</i>	
Dept. de Bioquímica i Biologia Molecular	Jaroslav Burda	CS
UB	Charles University in Prague	
	27-9-04 / 22-10-04 (21 CPQ, 346 SGI)	HPC

Theoretical Study of Ribozymes

Nadía Spacková		CS
Academy of Sciences of the Czech Republic		
	(421 CPQ)	IHP

Ferran Sanz	<i>New strategies in GPCR Modelling</i>	
IMIM, UPF	Hans-Dieter Holtje	DE
	n/a	
	3-3-04 / 26-3-04	HPC

Ferran Sanz	<i>Similarity Calculations for Early ADME-Profiling</i>	
IMIM, UPF	Gerhard Ecker	AU
Jordi Mestres	University of Viena	
IQC, UdG	12-9-04 / 2-11-04	HPC

Informàtica

José Ma. Cela	<i>Study of critical properties of High-T_c superconductors using Monte Carlo methods</i>	
Dept. d'Arquitectura de Computadors	Massimo Camarda	IT
UPC	University of Catania	
	7-10-04 / 2-12-04 (81 SGI, 2 SP3)	HPC

Àlex Ramírez	<i>Dangling Rename Registers in the Intrathreads architecture</i>	
Dept. d'Arquitectura de Computadors	Alex Gontmakher	IL
UPC	n/a	
	9-2-04 / 1-3-04	HPC

Mateo Valero	<i>Prefetching for The Kilo-Instruction Processor</i>	
Dept. d'Arquitectura de Computadors	Matherey Bracamonte	SE
UPC	n/a	
	5-10-04 / 4-1-05	HPC

	<i>Quality of Service for Simultaneous Multithreaded Architectures</i>	
	Peter M.W. Knijnenburg	NL
	Leiden Institute of Advanced Computer Science	
	18-2-04 / 29-2-04	IHP
Mateo Valero / Àlex Ramírez	<i>Hardware Schedulers for Asynchronous Clustered Chip</i>	
Dept. d'Arquitectura de Computadors	<i>Multiprocessors</i>	
UPC	Tomer Morad	IL
	Technion	
	3-8-04 / 22-10-04 (133 SGI, 6.903 SP3)	HPC
Altra		
Jordi Mompart	<i>Coherent manipulation of atoms in atomic waveguides</i>	
Dept. de Física	Kai Eckert	DE
UAB	Universitaet Hannover	
	9-9-04 / 30-10-04 (412 SGI)	HPC

Els codis de les màquines usades són els següents:

CPQ	HPC320 / beowulf / GS1280
HP	V2500 / N4000 / Itanium
GS	CPQ GS140 / CPQ GS160
SP3	IBM RS-6000 SP
SGI	O2000

i els dels països corresponents als dominis de primer nivell:

AT	Àustria	HU	Hongria
CS	República Txeca	IL	Israel
DE	Alemanya	IT	Itàlia
DK	Dinamarca	NL	Holanda
ES	Espanya	PT	Portugal
FR	França	SE	Suècia
UK	Regne Unit	LT	Lituània

L'evolució de visites rebudes per cada institució, per àrea de coneixement i per país de procedència dels visitants durant els últims cinc anys és la següent:

	2000	2001	2002	2003	2004
Visites per institució					
Universitat de Barcelona	11	13	16	23	10
Universitat Autònoma de Barcelona	8	4	8	4	3
Universitat Politècnica de Catalunya	12	10	16	7	7
Universitat Pompeu Fabra	3	1		2	2
Universitat de Girona	3	4	4	6	1
Universitat Rovira i Virgili	1	2	2	2	
CSIC	3	2	5	1	2
Visites per àrea de coneixement					
Física	5	2	8	2	2
Química teòrica	19	19	28	27	14
Modelització biomolecular	8	4	4	7	3
Ciències de la Terra					
Mètodes numèrics en enginyeria	2	2	3		
Informàtica	6	7	5	6	5
Altres	1	2	3	3	1
País d'origen					
Alemanya	4	4	5	5	3
Àustria	1		2		1
Bèlgica	2	5	5	5	
Dinamarca	2	2	3	2	
Finlàndia		1	1	6	
França	9	5	12		2
Grècia	1			5	
Holanda		2	4	1	2
Israel	1			9	2
Itàlia	11	5	6		7
Regne Unit	4	5	6	6	1
República Txeca	1	1	2	4	2
Romania		2		1	
Altres	5	4	5	1	5
Total	41	36	51	45	25

Annex VI:

Les tesis doctorals més consultades

Aquest annex descriu la relació de les 30 tesis doctorals més consultades en general i, si s'escau, les tres més consultades de cada universitat durant l'any 2004¹. 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. <i>Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización</i>		
Comunicació Audiovisual i Publicitat		UAB
Autor:	Gerardo Javier Macías Cortés	11-02-03
Director:	Mario Herreros	6,6‰
2. <i>Sistema de inyección no cartográfico para motores de ciclo otto. Gestión de transitorios</i>		
Màquines i Motors Tèrmics		UPC
Autor:	Ernesto Gutiérrez González	17-01-03
Director:	Jesús Andrés Álvarez Florez	4,6‰
3. <i>Mantenimiento integral de motores d'encesa per compressió de cogeneració mitjançant l'anàlisi del lubricant. Validació experimental de nous paràmetres de control</i>		
Màquines i Motors Tèrmics		UPC
Autor:	Josep Ramon González Castro	25-07-01
Director:	Ramon Carreras Planells	4,3‰
4. <i>Educación del razonamiento lógico matemático en Educación Infantil</i>		
Didàctica de les Ciències Experimentals i la Matemàtica		UB
Autor:	María Pilar Ruesga Ramos	07-07-03
Director:	Mariela Orozco Hormaza	4,2‰
5. <i>Aportaciones al estudio de los motores de inducción magnetohidrodinámica</i>		
Enginyeria Elèctrica		UPC
Autor:	Lluís Massagues Vidal	27-07-01
Director:	Ricardo Bosch Tous	3,7‰

¹ El nombre de consultes correspon al nombre de vegades que la pàgina principal de cada tesi ha estat accedida. És possible que el mateix lector hi accedeixi més d'un cop. Per això, s'ha verificat aleatòriament que els accessos siguin majoritàriament d'adreces IP o computadors diferents. Per exemple, la tesi més consultada ha rebut 7.876 consultes provinents de 6.118 computadors diferents, un 78%; per a les altres tesis verificades, aquest percentatge varia des d'un 58% a un 40%.

6. *Caracterización termomecánica de aceros inoxidables austeníticos AISI-304*
 Ciència dels Materials i Enginyeria Metal·lúrgica UPC
 Autor: Mohammed El Wahabi 20-03-03
 Director: José Manuel Prado Pozuelo, José María Cabrera Marrero 3,5‰
7. *Determinación de los factores de emisión de monoterpenos en tres especies típicas de la vegetación terrestre mediterránea: Pinus pinea, Pinus halepensis y Quercus ilex*
 Enginyeria Química UPC
 Autor: Danelia Sabillón Rodríguez 08-01-02
 Director: Lazaro Vicente Cremades Oliver 3,4‰
8. *El Análisis del nuevo discurso político. Acercamiento metodológico al estudio del discurso persuasivo audiovisual*
 Periodisme i Comunicació Audiovisual UPF
 Autor: Aranzazu Capdevila Gómez 03-07-02
 Director: Jordi Pericot Canaleta 3,4‰
9. *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
 Autor: Laura Murguía Sánchez 04-11-02
 Director: Ramón San Martín Paramo 3,2‰
10. *Las clases sociales como forma de interacción social. Una estrategia de aproximación*
 Sociologia UAB
 Autor: Enrico Mora Malo 03-09-02
 Director: M. Jesús Izquierdo 3,1‰
11. *Modelización de interruptores eléctricos de potencia*
 Enginyeria Elèctrica UPC
 Autor: Walter Fernando Giménez Gutiérrez 02-06-00
 Director: Juan Carlos Gomez Targarona 3,1‰
12. *Hacia el motor superconductor: estudio de las interacciones entre un rotor superconductor y un estator convencional*
 Enginyeria Elèctrica UPC
 Autor: Miquel Joan Pallarès Viña 22-04-02
 Director: Ricard Bosch Tous, Javier A. J. Granados Garcia 3,0‰
13. *La habitabilidad energética en edificios de oficinas*
 Construccions Arquitectòniques I UPC
 Autor: Vicente Hernández Chávez 16-12-02
 Director: Rafael Serra Florensa 2,9‰

14. *Vulnerabilidad y riesgo sísmico de edificios. Aplicación a entornos urbanos en zonas de amenaza alta y moderada*
 Enginyeria del Terreny Cartogràfica i Geofísica UPC
 Autor: Ricardo León Bonett Díaz 15-12-03
 Director: Luis G. Pujades Beneit, Jorge Eduardo Hurtado Gomez 2,9‰
15. *El dibujo arquitectónico: crisol de intenciones*
 Expressió Gràfica Arquitectònica I UPC
 Autor: M^a Isabel Ruiz Castrillo 24-01-97
 Director: Antonio Millán Gómez 2,8‰
16. *Inversión extranjera directa en México: determinantes y pautas de localización*
 Economía Aplicada UAB
 Autor: Alejandro S. Ramírez Torres 26-07-02
 Director: José L. Roig Sabaté 2,8‰
17. *Desarrollo de métodos de electroforesis capilar en fase micelar. Aplicación al análisis de herbicidas y de sus productos de degradación*
 Enginyeria Química UPC
 Autor: Santiago Ruiz Marrondo 02-10-01
 Director: Adriana Farran Marsa 2,8‰
18. *Endogamia, exogamia y relaciones interétnicas. Un estudio sobre la formación y dinámica de la pareja y la familia centrado en inmigrantes de Senegal y Gambia entre Cataluña y África*
 Filosofia UAB
 Autor: Dan Rodríguez García 08-07-02
 Director: Aurora González Echevarría 2,7‰
19. *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 2,6‰
20. *A Geometrical Domain Decomposition Methods in Computational Fluid Dynamics*
 Resistència de Materials i Estructures a l'Enginyeria UPC
 Autor: Guillaume Houzeaux 10-05-02
 Director: Ramon Codina Rovira 2,5‰
21. *Aportación a la linealización de amplificadores de potencia mediante la teoría de la hiperestabilidad*
 Teoria del Senyal i Comunicacions UPC
 Autor: Alfonso Zozaya Sahad 19-07-02
 Director: Jordi Berenguer Sau, Eduard Bertran Albertí 2,5‰

22. *El control de gestión en organizaciones sin ánimo de lucro: el caso particular de los colegios de economistas de España*
 Economía i Empresa UPF
 Autor: Pilar Soldevila García 05-07-00
 Director: Oriol Amat Salas 2,5‰
23. *Modelo setar aplicado a la volatilidad de la rentabilidad de las acciones: algoritmos para su identificación*
 Estadística i Investigació Operativa UPC
 Autor: Maria Dolors Márquez Cebrián 27-05-02
 Director: César Villazón Hervás 2,4‰
24. *Percepción Artificial de Dibujos Lineales*
 Tecnologia UJI
 Autor: Ana Piquer Vicent 07-11-03
 Director: Pedro Company Calleja 2,4‰
25. *Grupo Archigram, 1961-1974. Uma Fábula da técnica*
 Composició Arquitectònica UPC
 Autor: Claudia Pianta Costa Cabral 25-02-02
 Director: José M. Montaner Martorell 2,4‰
26. *Estudio de la contaminación por metales pesados en la cuenca del Llobregat*
 Enginyeria Minera i Recursos Naturals UPC
 Autor: Hermógenes Rosas Rodríguez 06-07-01
 Director: José María Casas Sabata, Concepción Lao Luque 2,3‰
27. *Desarrollo de una bomba de calor de absorción a gas con fluidos orgánicos e intercambiadores de placas*
 Enginyeria Química URV
 Autor: Miquel Nogués Aymamí 26-07-01
 Director: Alberto Coronas Salcedo 2,3‰
28. *Improvements in direct torque control of induction motors*
 Enginyeria Electrònica UPC
 Autor: Antoni Arias Pujol 01-03-01
 Director: José Luís Romeral Martínez 2,2‰
29. *Aplicación de las redes neuronales en los sistemas de control vectorial de los motores de inducción*
 Enginyeria Elèctrica UPC
 Autor: Gamal Mahmoud Ali Sowilam 25-09-00
 Director: Ángel Luís Orille Fernández 2,2‰
30. *Proposal of a model for the management of active networks based on policies*
 Teoria del Senyal i Comunicacions UPC
 Autor: Julio Vivero Millor 12-12-03
 Director: Juan Serrat Fernandez 2,2‰

44. *Síntesis de carboximetilcelulosa (CMC) a partir de pastas de plantas anuales*
 Enginyeria Química URV
 Autor: Claudia Barba Pacheco 28-06-02
 Director: Xavier Farriol Roigés, Daniel Montané Calaf 1,9‰
54. *Determinación del equilibrio líquido-vapor de agua, aromáticos y sus mezclas mediante simulación molecular*
 Enginyeria Química URV
 Autor: René Oliver Contreras Camacho 04-10-02
 Director: Allan Donald Mackie 1,8‰
63. *Biosíntesis del lipopolisacárido de Klebsiella Pneumoniae*
 Microbiologia UB
 Autor: Luis Izquierdo Lázaro 21-03-03
 Director: Juan Tomás Magaña 1,7‰
70. *Análisis de la apertura comercial en México mediante modelos multisectoriales, 1970-93*
 Teoria Econòmica UB
 Autor: Joana Cecilia Chapa Cantú 10-06-03
 Director: Josep González Calvet 1,6‰
73. *El concepto de democracia en A. de Tocqueville (una lectura filosófico-política de La Democracia en América)*
 Filosofia, Sociologia i Comunicació Audiovisual i Publicitat UJI
 Autor: Juan Manuel Ros Cherta 15-06-00
 Director: Adela Cortina Orts, Vicente Domingo Garcia Marzá 1,6‰
75. *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
 Autor: Christine Pauleau 17-11-00
 Director: Fernando Cerdà Alberó, Francisco Vicent Chuliá 1,6‰
83. *La responsabilidad moral de la empresa. Una revisión de la teoría de Stakeholder desde la ética discursiva*
 Filosofia, Sociologia i Comunicació Audiovisual i Publicitat UJI
 Autor: Elsa González Esteban 21-12-01
 Director: Domingo García-Marzá 1,6‰
86. *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: Jesús Conill Sancho 1,6‰

91. *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 Fàbregas 17-12-99
 Director: Manuel Poch Espallargas 1,5‰
98. *Conceptualización de la calidad de servicio al cliente percibida en el comercio electrónico. Evaluación y aplicación en el establecimiento virtual*
 Administració d'Empreses i Gestió Econòmica dels Recursos Naturals UdL
 Autor: Eduard Cristobal Fransi 12-12-01
 Director: Inmaculada Rodríguez Ardura 1,5‰
99. *Del alma fuerte al superhombre. Descartes y Nietzsche: dos versiones del sujeto moderno*
 Metafísica i Teoria del Coneixement UV
 Autor: Elena Nájera Pérez 25-10-02
 Director: Vicente Sanfèlix Vidarte 1,5‰
113. *Desarrollo de marcadores moleculares de aplicación en genómica y programas de mejora de cítricos*
 Genètica UV
 Autor: Carlos Ruiz Lafora 20-02-02
 Director: M^a José Asíns Cebrián 1,4‰
145. *Análisis y diseño orientado a objetos de un framework para el modelado estadístico con MLG*
 Psicologia UIB
 Autor: Rafael Jiménez López 05-09-03
 Director: Josep M Losilla Vidal, Alfonso L. Palmer Pol 1,3‰
207. *Los términos de la física en los diccionarios generales y especializados*
 Filologia Clàssica, Francesa i Hispànica UdL
 Autor: José Luis Orduña López 26-07-02
 Director: Maria Nieves Vila Rubio 1,1‰
298. *La consultoría especializada en ISO 9000 en Cataluña: calidad del servicio y beneficios*
 Enginyeria Industrial UdG
 Autor: Frederic Marimon Viadiu 11-07-03
 Director: Martí Casadesús Fa 0,9‰
349. *Análisis del régimen jurídico del proceso constructivo de la edificación*
 Dret Públic UdG
 Autor: Josep Castellano Costa 30-06-00
 Director: Ramón Paniagua Redondo 0,8‰

442. <i>El arancel de los funcionarios públicos: un estudio de Derecho Tributario</i>		
Dret Públic		UIB
Autor: Ricardo Navarro Gómez		09-03-02
Director: Victoria E. Combarros Villanueva		0,7‰
492. <i>Para una pedagogía del hipertexto: Una teoría entre la deconstrucción y la complejidad</i>		
Ciències de l'Educació		UIB
Autor: Rocío Rueda Ortiz		13-06-03
Director: Antonio J. Colom Cañellas		0,6‰
508. <i>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</i>		
Internet Interdisciplinary Institut (IN3)		UOC
Autor: Joan Torrent i Sellens		29-07-02
Director: Jordi Vilaseca i Requena		0,6‰
625. <i>Historia, sociedad, tecnología y crecimiento de la red. Una aproximación divulgativa a la realidad más desconocida de Internet</i>		
Empresa i Tecnologia		URL
Autor: Andreu Veà i Baró		12-09-02
Director: Jordi Dalmau Royo		0,5‰

Curiosament, les tres tesis més consultades de la URV han estat del mateix departament, Enginyeria Química (a les posicions 27, 44 i 54).

El nombre de tesis doctorals incorporades anualment al servidor per universitat és el següent:

	2000	2001	2002	2003	2004	Subtotal
Catalunya	1	289	492	528	640	1.950
UB		9	118	123	123	373
UAB		145	257	219	303	924
UPC	1	76	72	90	108	347
UPF		2	11	21	17	51
UdG		12	9	15	61	97
UdL		45	3	22	1	71
URV			21	38	26	85
UOC			1			1
URL					1	1
Altres comunitats				28	164	192
UJI				16	20	36
UIB				2	3	5
UV				10	141	151
Total	1	289	492*	556*	804	2.142

* Durant l'any 2004 s'han esborrat 2 tesis entrades l'any 2003 de la UdG i la UV, i 1 tesi entrada l'any 2002 de la UPF.

La distribució percentual de matèries per universitat per a les 30 tesis més consultades enguany, classificades amb 45 matèries, és:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Subtotal
UB				2%						2%
UAB				11%						11%
UPC	2%			2%	18%	31%	13%			67%
UPF	4%			7%		2%				13%
UdL						2%				2%
URV						2%				2%
UJI	2%									2%
Total	9%			22%	18%	38%	13%			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 804 tesis incorporades enguany, amb 1.089 matèries, és:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Subtotal
Catalunya	3%	3%	0%	13%	28%	29%	2%	2%	2%	82%
UB		1%		2%	6%	3%	0%	0%	1%	13%
UAB	0%	1%		6%	9%	9%	0%	1%	1%	28%
UPC	1%	0%	0%	2%	6%	12%	2%	0%	0%	24%
UPF	0%			0%	1%	0%		0%	0%	2%
UdG	0%	0%		1%	4%	3%	0%		0%	10%
UdL				0%						0%
URV	0%	0%		0%	2%	1%		0%	0%	5%
UOC										0%
URL	0%			0%		0%				0%
Altres comunitats	1%	3%	0%	3%	6%	3%	0%	1%	1%	18%
UJI	1%	1%	0%	1%	1%	0%	0%	0%	0%	4%
UIB		0%		0%						0%
UV		2%		3%	5%	2%	0%	1%	1%	14%
Total	3%	6%	0%	16%	34%	32%	3%	3%	3%	100%

Si s'inclouen totes les 2.142 tesis amb les 2.824 matèries, la distribució percentual és:

	0	1	2	3	5	6	7	8	9	Subtotal
Catalunya	3%	3%	0%	15%	28%	34%	4%	3%	3%	92%
UB	0%	1%		2%	6%	5%	1%	0%	0%	16%
UAB	1%	2%		8%	10%	12%	0%	1%	1%	35%
UPC	1%	0%		2%	6%	11%	2%	0%	0%	23%
UPF	0%			1%	0%	0%		0%	0%	2%
UdG	0%	0%		1%	2%	2%			0%	6%
UdL			0%	1%	0%	1%		0%	0%	2%
URV	1%	0%		1%	2%	2%		0%	0%	6%
UOC			0%							0%
URL				0%						0%
Altres comunitats	0%	1%	0%	2%	2%	1%	0%	1%	0%	8%
UJI	0%	0%	0%	1%	0%	0%		0%	0%	2%
UIB		0%		0%						0%
UV		1%		1%	2%	1%	0%	0%	0%	6%
Total	4%	4%	0%	17%	30%	35%	4%	4%	3%	100%

Tal i com ja va ocórrer el 2003, el nombre de consultes durant l'any 2004 s'ha quadruplicat respecte a les de l'any anterior (de 278.708 a 1.184.750) com a conseqüència de facilitar la indexació de les tesis pel buscador Google i la recopilació de metadades pels proveïdors de servei associats a l'Open Archives Initiative (OAI, <http://www.openarchives.org>). Entre d'altres proveïdors de servei, recopilen metadades del TDX els següents:

- 1) NDLTD Union Catalog (Networked Digital Library of Theses and Dissertations, <http://alcme.oclc.org/ndltd/index.html>).
- 2) OAIster (University of Michigan, <http://oaister.umdl.umich.edu/o/oaister>).
- 3) DP9–OAI Gateway Service for Web Crawlers (Old Dominion University, <http://arc.cs.odu.edu:8080/dp9/index.jsp>).
- 4) Open Archives Harvester-Public Knowledge Project (University of British Columbia, <http://pkp.ubc.ca/harvester>).
- 5) ARC-A Cross Archive Search Service (Old Dominion University Digital Library Research Group, <http://defiant.cs.odu.edu>).
- 6) Sail-eprints (Area della Ricerca di Bologna, <http://eprints.bo.cnr.it>).
- 7) Cybertesis (Universitat de Xile, <http://www.cybertesis.net>).

A més d'aquests proveïdors de servei, que recullen metadades i les mostren, també accedeixen al TDX altres proveïdors que no estan registrats a l'OAI com a proveïdors de servei, la qual cosa amplia la difusió de les tesis del TDX. D'entre aquests, es destaquen els següents:

- a) OAI Viewer (<http://errol.oclc.org>) de l'Online Computer Library Center (OCLC, www.oclc.org/about/default.htm). Més de 50.500 biblioteques de 84 països d'arreu del món usen els serveis d'OCLC per localitzar, adquirir, catalogar, prestar i preservar materials bibliotecaris. OCLC produeix i manté juntament amb les seves biblioteques membres WorldCat, un catàleg col·lectiu de més de 57 milions de registres bibliogràfics.
- b) Grainger Engineering Library Information Center at University of Illinois at Urbana-Champaign (<http://gita.grainger.uiuc.edu/registry/List.AllRepos.asp>).
- c) University of Southampton (ECS - Electronics and Computer Science) (<http://www.ecs.soton.ac.uk>).
- d) 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.
- e) Departament de Sistemes Informàtics i Computació de la Universitat Politècnica de València (<http://www.dsic.upv.es>).
- f) Universia (<http://biblioteca.universia.net>).

A part dels accessos via OAI també hi ha institucions com per exemple les universitats Complutense de Madrid i Rey Juan Carlos que enllacen directament el web del TDR.

L'evolució percentual de les consultes realitzades a les tesis de cada institució és la següent:

	2001	2002	2003	2004	Subtotal
Catalunya	100%	99%	99%	92%	94%
UB	4%	12%	13%	13%	13%
UAB	27%	22%	22%	28%	27%
UPC	53%	54%	51%	37%	40%
UPF	0%	2%	4%	3%	4%
UdG	7%	4%	2%	2%	2%
UdL	9%	3%	2%	2%	2%
URV		1%	4%	5%	5%
UOC		0%	0%	0%	0%
URL				0%	0%
Altres comunitats		0%	1%	8%	6%
UJI		0%	1%	2%	1%
UIB			0%	0%	0%
UV			1%	6%	5%
Total	100%	100%	100%	100%	100%

L'evolució històrica de les 30 tesis més consultades és la següent:

Autor (Institució)	Data lectura	2001		2002		2003		2004		Total
		#	‰	#	‰	#	‰	#	‰	
1. G. J. Macías (UAB)	2-03					948	0,3	1	6,6	5,2
2. E. Gutiérrez (UPC)	1-03					3	6,2	2	4,6	4,7
3. J. R. González (UPC)	7-01			17	6,5	4	5,9	3	4,3	4,7
4. Ll. Massaguer (UPC)	7-01	57	5,0	2	10,8	9	4,9	5	3,7	4,3
5. D. Sabillón (UPC)	1-02			45	5,0	10	4,9	7	3,4	3,7
6. M. P. Ruesga (UB)	7-03					74	2,5	4	4,2	3,7
7. L. Murguía (UPC)	11-02					2	6,3	9	3,2	3,6
8. M. J. Pallarès (UPC)	4-02					5	5,7	12	3,0	3,3
9. W. F. Giménez (UPC)	6-00	185	1,3	30	5,9	22	3,6	11	3,1	3,3
10. S. Ruiz (UPC)	10-01			3	8,8	14	4,2	17	2,8	3,3
11. M. El Wahabi (UPC)	3-03					64	2,7	6	3,5	3,2
12. O. D. Cardona (UPC)	12-01			1	13,5	1	6,4	51	1,8	3,1
13. V. Hernández (UPC)	12-02					16	4,0	13	2,9	3,0
14. A. Zozaya (UPC)	7-02			204	1,3	7	5,2	21	2,5	3,0
15. E. Mora (UAB)	9-02					90	2,4	10	3,1	2,8
16. G. Houzeaux (UPC)	5-02					13	4,2	20	2,5	2,7
17. A. Capdevila (UPF)	7-02					571	0,5	8	3,4	2,7
18. J. J. Brezmes (UPC)	12-01			16	6,7	15	4,1	34	2,1	2,7
19. H. Rosas (UPC)	7-01	21	9,5	11	6,9	44	3,0	26	2,3	2,6

Autor (Institució)	Data lectura	2001		2002		2003		2004		Total
		#	%	#	%	#	%	#	%	
20. G. M. A.Sowilam (UPC)	9-00	124	2,4	8	7,2	28	3,4	29	2,2	2,6
21. A. Arias (UPC)	3-01	40	6,1	6	8,1	64	2,7	28	2,2	2,6
22. J. Pagan (UdL)	4-96	113	2,6	298	0,9	70	2,6	19	2,6	2,6
23. P. Soldevila (UPF)	7-00			128	2,5	62	2,7	22	2,5	2,5
24. A. S. Ramírez (UAB)	7-02					132	2,0	16	2,8	2,5
25. M. D. Márquez (UPC)	5-02					31	3,3	23	2,4	2,4
26. J. Nevot (UPC)	3-00	39	6,2	38	5,4	8	4,9	78	1,6	2,4
27. D. González (UPC)	9-01	149	1,8	9	7,0	62	2,7	36	2,1	2,4
28. D. Rodríguez (UAB)	7-02					254	1,2	18	2,7	2,3
29. G. Fortuny (UPC)	6-02					26	3,4	33	2,1	2,3
30. M ^a I. Ruiz (UPC)	1-97					464	0,6	15	2,8	2,3

A diferència dels anys anteriors, per primera vegada, la tesi més consultada no ha estat tècnica sinó humanista i ha esdevingut també la tesi més consultada en el rànquing acumulat:

1. *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*, del Dr. Gerardo Javier Macías Cortés, dirigida pel Dr. Mario Herreros del Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB i llegida al febrer de 2003.

Encara que les tesis de la UPC continuïn rebent més consultes (en mitjana un 40%) que les de les altres universitats, aquest factor s'ha anat reduïnt en el temps a mesura que el servei s'ha donat a conèixer en tots els àmbits de la recerca: 54% de les consultes l'any 2002, 51% el 2003 i 37% el 2004.

Aquest fenomen també s'ha donat per a les 30 tesis més consultades. En els anys 2002 i 2003 el nombre de tesis de la UPC entre les 30 més consultades era de 27, i només una era de la UAB i dues de la UB. En canvi l'any 2004, hi ha 20 de la UPC i 10 d'altres universitats (1 de la UB, 4 de la UAB, 2 de la UPF, 1 de la URV, 1 de la UdL i 1 de la UJI). Vuit d'elles, a més, apareixen entre les 30 més consultades del rànquing acumulat (a les posicions 1, 6, 15, 17, 22, 23, 24 i 28).

Totes les tesis en el rànquing acumulat han estat llegides en el període 2000-03, excepte dues:

22. *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón*, del Dr. Jordi Pagan i Gilabert, dirigida pel Dr. Albert Ibarz Ribas del Departament de Tecnologia d'Aliments de la UdL, llegida a l'abril de 1996 i introduïda a l'abril de 2001.
30. *El dibujo arquitectónico: crisol de intenciones*, de la Dra. M^a Isabel Ruiz Castrillo, dirigida pel Dr. Antonio Millán Gómez del Departament d'Expressió Gràfica Arquitectònica I de la UPC, llegida el gener de 1997 i introduïda al novembre de 2003.

El Departament d'Enginyeria Elèctrica, amb 15 tesis incorporades al TDX, ha repetit l'èxit dels dos últims anys en tenir el major nombre de tesis consultades entre les 30 primeres: quatre l'any 2004 (a les posicions 5, 11, 12 i 29), cinc l'any 2003 (a les 5, 9, 22, 28 i 29) i quatre l'any 2002 (a les 2, 7, 8 i 30). Les quatre d'enguany també figuren entre les 20 primeres del rànquing acumulat:

4. *Aportaciones al estudio de los motores de inducción magnetohidrodinámica*, del Dr. Lluís Massagues, dirigida pel Dr. Ricard Bosch i llegida al juliol de 2001.
8. *Hacia el motor superconductor: estudio de las interacciones entre un rotor superconductor y un estator convencional*, del Dr. Miquel J. Pallarès, dirigida pels Drs. Ricard Bosch i Javier Granados i llegida l'abril de 2002.
9. *Modelización de interruptores eléctricos de potencia*, del Dr. Walter Fernando Giménez Gutiérrez, dirigida pel Dr. Juan Carlos Gomez Targaroni i llegida al juny de 2000.
20. *Aplicación de las redes neuronales en los sistemas de control vectorial de los motores de inducción*, del Dr. Gamal Mahmoud Ali Sowilam, dirigida pel Dr. Ángel Luís Orille Fernández i llegida al setembre de 2000.

Hi ha altres tres departaments (Màquines i Motors Tèrmics, Enginyeria Química i Construccions Arquitectòniques I), els tres de la UPC, que tenen dues tesis cadascun entre les 30 primeres del rànquing acumulat:

2. *Sistema de inyección no cartográfico para motores de ciclo otto. Gestión de transitorios*, del Dr. Ernesto Gutiérrez González, dirigida pel Dr. Jesús Andrés Álvarez Florez i llegida al gener de 2003.
3. *Mantenimiento integral de motores d'encesa per compressió de cogeneració mitjançant l'anàlisi del lubricant. Validació experimental de nous paràmetres de control*, del Dr. Josep Ramon González Castro, dirigida pel Dr. Ramon Carreras Planells i llegida al juliol de 2001.
5. *Determinación de los factores de emisión de monoterpenos en tres especies típicas de la vegetación terrestre mediterránea: Pinus pinea, Pinus halepensis y Quercus ilex*, de la Dra. Danelia Sabillón Rodríguez, dirigida pel Dr. Lázaro Vicente Cremades Oliver i llegida al gener de 2002.
10. *Desarrollo de métodos de electroforesis capilar en fase micelar. Aplicación al análisis de herbicidas y de sus productos de degradación*, del Dr. Santiago Ruíz Marrondo, dirigida per la Dra. Adriana Farran Marsa i llegida a l'octubre de 2001.
7. *La luz en la arquitectura. Su influencia sobre la salud de las personas. Estudio sobre la variabilidad del alumbrado artificial en oficinas*, de la Dra. Laura Murguía Sánchez, dirigida pel Dr. Ramón San Martín Paramo i llegida al novembre de 2002.

13. *La habitabilidad energética en edificios de oficinas*, del Dr. Vicente Hernández Chávez, dirigida pel Dr. Rafael Serra Florensa i llegida al desembre de 2002.

Els nostres usuaris de supercomputació han introduït 148 tesis, 40 com a autor i 130 com a director. Les tres tesis més consultades són:

16. *A Geometrical Domain Decomposition Methods in Computational Fluid Dynamics*

Resistencia de materiales i estructures a l'arquitectura UPC

Autor: Guillaume Houzeaux 13-01-03

Director: Ramon Codina Rovira 2,71‰

34. *Vulnerabilidad sísmica de edificaciones esenciales. Análisis de su contribución al riesgo sísmico*

Enginyeria del terreny cartogràfica i geofísica UPC

Autor: Salvador Safina Melone 25-02-03

Director: Antoni Roca Adrover, Lluís G. Pujades Beneit 2,20‰

35. *Síntesis de zeolitas a partir de cenizas volantes de centrales termoeléctricas de carbón*

Enginyeria minera i recursos naturals UPC

Autor: Juan Carlos Umaña Peña 29-04-02

Director: José María Mata Perello, Xavier Querol Carceller 2,19‰

Annex VII:

Les institucions adherides a l'Anella Científica

Al llarg de 2004 l'Anella Científica, basada amb 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 la e-Ciència i la Societat de la Informació a Catalunya.

S'han incorporat quatre noves institucions: el Barcelona Supercomputing Center a 1 Gbps amb una connexió local¹; la Fundació Gran Teatre del Liceu a 100 Mbps, la Fundació Puigvert a 10 Mbps, i el Museu de Vilafranca, Museu del Vi Fundació Privada a 4 Mbps per ADSL. El nombre total d'institucions adherides és de 51, dues d'elles pendents de connexió.

S'han produït increments de cabal en diversos punts d'accés: la UAB de 200 Mbps a 500 Mbps passant a una connexió física d'un Gigabit, l'IGTP de 2 Mbps a 10 Mbps i l'ESMUC d'una connexió amb ADSL de 2 Mbps a una de 10 Mbps amb Giganet. Cal destacar que el CSIC ha millorat les seves connexions passant de 10 a 100 Mbps en la connexió local cap al CESCA i que la Delegació està compartint el punt d'accés de la seu de l'IEC que disposa de 20 Mbps, 10 per cada institució. També al punt d'accés del VHebron la unitat docent de la UAB està usant 10 Mbps dels 100 Mbps després d'haver donat de baixa la connexió que usaven de 2 Mbps Frame Relay.

Els punts d'accés connectats directament a l'Anella s'han incrementat en 17. Dos corresponen a noves institucions (Museu del Vi i Puigvert) i tres són d'institucions pendents de connexió de l'any 2003 (CTFC, ICIQ i UIC). Els 12 restants són: un a 16 Mbps (de l'HGV); sis a 10 Mbps (URL-ETSI, CatSalut, EUSS, IDESCAT i dos de l'IEC) i cinc amb tecnologia ADSL (dos de la UdG, dos de l'IRTA, i un del CConsultiu). En total el nombre de punts és de 53, un cop comptabilitzada la baixa mencionada abans.

La taula de la pàgina següent mostra totes les institucions adherides a l'Anella Científica, agrupades per la categoria on han estat classificades. Per cadascuna es proporciona l'acrònim identificador del punt d'accés, el tipus de connexió —local com per exemple les que arriben al Campus Nord (C.N.), 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.

¹ L'acord d'adhesió està pendent de signar a l'espera que aquest centre tingui personalitat jurídica pròpia.

Institucions	Acrònim	Connexió	Velocitat
A.1: Universitats públiques i privades, sense ànim de lucre			
Universitat de Barcelona	UB	Local (C.N.)	1 Gbps
Universitat Autònoma de Barcelona	UAB	Giganet	500 Mbps
• Campus de Sabadell	Sabadell	Ethernet	34 Mbps
• Fundació Institut d'Investigació Germans Trias i Pujol	IGTP	Ethernet	10 Mbps
Universitat Politècnica de Catalunya	UPC	Local (C.N.)	1 Gbps
• Consorci Escola Tècnica d'Igualada	CETI	Frame Relay	2 Mbps
• Escola Politècnica de Mataró	EUPMT	Ethernet	10 Mbps
Universitat Pompeu Fabra	UPF	Giganet	100 Mbps
• Centre de Regulació Genòmica ^a	CRG	Local (UPF)	10 Mbps
Universitat de Girona	UdG	Giganet	100 Mbps
• Escola Universitària de Turisme	Turisme	ADSL	4 Mbps
• Fundació Universitat de Girona: Innovació i Formació	Mercadal	ADSL	4 Mbps
Universitat Rovira i Virgili	URV	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	10 Mbps
• Fundació Blanquerna	Blanquerna	Giganet	10 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	10 Mbps
• Escola Universitària de Turisme Sant Ignasi ESADE	ETSI	Giganet	10 Mbps
Universitat de Vic	UVic	Ethernet	34 Mbps
Universitat Internacional de Catalunya ^d	UIC	Ethernet	10 Mbps
Universitat Abat Oliba ^d	AbatOliba	Ethernet	10 Mbps
Escola Superior de Música ^d	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 ^b	IESE	PaP (C.N.)	64 Kbps
A.2: Organismes Públics d'Investigació i Grans Instal·lacions Científiques			
Barcelona Supercomputing Center ^{b, d}	BSC	Local (C.N.)	1 Gbps
Centre de Supercomputació de Catalunya	CESCA	Local (C.N.)	1 Gbps
CSIC a Catalunya	CSIC	Local (IEC)	10 Mbps
• Institut Jaume Almera	IJA	Local (C.N.)	100 Mbps
• Residència d'Investigadors ^a	RI	Local (IEC)	10 Mbps
A.3: Altres institucions d'investigació, sense ànim de lucre			
Agència de Salut Pública de Barcelona	ASPB	Giganet	10 Mbps
Centre de Terminologia TERMCAT	TERMCAT	PaP (C.N.)	512 Kbps

Institucions	Acrònim	Connexió	Velocitat
Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya	CTTC	Local (C.N.)	10 Mbps
Centre Tecnològic Forestal de Catalunya ^d	CTFC	ADSL	4 Mbps
Consorci Hospitalari de Vic	HGV	Ethernet	16 Mbps
Corporació Sanitària Parc Taulí	CSPT	Ethernet	34 Mbps
Fundació i2cat, Internet i Innovació Digital a Catalunya ^d	I2CAT	Local (C.N.)	1 Gbps
Fundació Puigvert ^d	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 Cartogràfic de Catalunya	ICC	Giganet	10 Mbps
Institut Català d'Investigació Química ^d	ICIQ	Ethernet	10 Mbps
Institut de Geomàtica	IdeG	Frame Relay	512 Kbps
Institut Dexeus	IDexeus	PaP (C.N.)	64 Kbps
Institut d'Estadística de Catalunya	IDESCAT	Giganet	10 Mbps
Institut d'Estudis Catalans	IEC	Giganet	10 Mbps
• Seu del carrer Capmany	Capmany	Giganet	10 Mbps
Institut de Recerca en Tecnologies Agroalimentàries	IRTA	Giganet	10 Mbps
• Estació Experimental Fundació Mas Badia	Badia	ADSL	4 Mbps
• Centre d'Aqüicultura	Aqüicultura	ADSL	4 Mbps
Institut de Recerca Oncològica	IRO	PaP (C.N.)	512 Kbps
Parc Astronòmic Montsec ^{a, d}	PAM	Local (UdL)	10 Mbps
B.1: Organismes gestors de programes d' R+D+i			
Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial ^d	CIDEM		
• Seu central i delegacions de Girona i Tarragona	BCN, GI, T	Giganet	10 Mbps
• Delegació de Lleida	Lleida	Frame Relay	2 Mbps
Fundació Catalana per a la Recerca	FCR	Giganet	10 Mbps
B.2: Institucions amb continguts digitals rellevants			
Biblioteca Abadia de Montserrat ^c	AbMontserrat		
Centre UNESCO de Catalunya ^d	UnescoCAT	PaP (C.N.)	384 Kbps
Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya	CConsultiu	ADSL	4 Mbps
Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya	CBUC	Local (C.N.)	100 Mbps
Fundació Centre de Documentació Política ^d	CDP	Giganet	10 Mbps
Fundació Gran Teatre del Liceu ^{a, d}	Liceu	Giganet	100 Mbps
Museu de Vilafranca, Museu del Vi Fundació Privada ^e	Museu del Vi	ADSL	4 Mbps
Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona ^c	RACAB		
B.4: Entitats d'especial interès per al sistema d'R+D+i			
Diputació de Barcelona (Xarxa de Biblioteques) ^b	DIBA	PaP (C.N.)	64 Kbps
Servei Català de la Salut	CatSalut	Giganet	10 Mbps
Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya	XTEC	Giganet	100 Mbps

^a En procés de connexió.

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

^c Actualment sense connexió directa a l'Anella Científica.

^d Institució pendent d'afiliació a RedIRIS.

^e Institució sense sortida a través de RedIRIS.

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:

	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004
Núm. inst.	33	34	35	37	38	41	47	51
≥ 500							4	6
100 - 155	0	3	3	3	3	3	11	12
10 - 34	12	8	8	11	13	15	16	21
2 - 4	4	6	8	8	6	8	2	3
< 2	17	17	16	15	16	15	14	9
N. punts	8	15	16	17	19	27	37	53
≥ 500							1	2
100 - 155		1	1	1	1	1	13	12
10 - 34	8	5	5	8	11	14	17	29
≤ 4		9	10	8	7	12	6	10
Capacitat agregada dels punts d'accés								
Mbps	80	343	345	443	543	657	2.653	3.111

Annex VIII:

Els servidors allotjats i hostatjats

El Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS) ha experimentat 10 noves incorporacions (2 allotjaments i 8 hostatges) i dues baixes, una de cada tipus.

Els nous servidors allotjats són un del Departament d'Universitats Recerca i Societat de la Informació per al projecte UNEIX i un del Centre Tecnològic Forestal de Catalunya, i els hostatjats són el domini i el web de la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat, dos dominis de l'Institut Català de Nanotecnologia, dos dominis de l'Institut Català d'Investigació Química, el domini i el web de la Asociación Internacional Política y Gestión Universitaria, el web de l'Observatorio para la CiberSociedad i la base de dades UNEIX del DURSI.

Les baixes han estat el servidor allotjat de l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya i el web *Transfíne* de l'EUCEN. En total, hi ha 11 servidors allotjats i 88 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	2 H	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	
Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya	CConsultiu	H	W, D, C	1999	
			BD	2004	
Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya	CBUC	H	W, D, C, L	1997	
		3 A		2002	
Consorci HOISe-NM (Genias)		• Enterthegrid	H	W, D, C	1998
		• Primeur	H	W, D, C, L	1998
		• Virtual Medical Worlds	H	W, D, C	1998
Departament d'Universitats, Recerca i SI		• Intercampus	A	W	2000
			H	W, D, BD	2003
	• Barcelona Centre Universitari	BCU	H	W, C	2000
				BD	2004
	• Aprenentatge del català	Intercat	H	W	2001
	• Xarxa de Telecentres	NODAT	3 A	W	2003
	• Estudiar a Catalunya (CIC)		H	W, D, C, BD	2003
55 H			D		

Institució	Acrònim	Tipus	Servei	Des de
• Observatorio para la CiberSociedad	Cibersociedad	H	W, BD	2004
• <i>Data warehouse</i>	UNEIX	A H	W BD	2004
• Asociación Int. Política y Gestión Universitaria	GPU-AI	H	W, D, C	2004
Hewlett-Packard's HPC European User Group	HP ² EUG	A H	W, C, L D	1999
Institut Català d'Investigació Química	ICIQ	2 H	D	2004
Institut d'Estudis Catalans	IEC	H	W, L	2001
• Revista <i>Contributions to Science</i>	Cat-Science	H	W, L, C, D	2000
• Societat Catalana de Física	SCF	H	W,D	1999
Institut d'Estudis Espacials de Catalunya	IIEEC	A		2003-04
Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona	RACAB	H	W, D, C	1998
Servei de Meteorologia de Catalunya	SMC	A		2001
Universitat Autònoma de Barcelona				
• European Universities Continuing Education Network	EUCEN	H H	W, D, C, L W, D	2001 2001-04
• Institut Català de Nanotecnologia	Nanocat	2 H	D	2004
Universitat de Barcelona				
• Informació Meteorològica	Infomet	H	W, L	2000
Universitat Ramon Llull	URL	H	W	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 el següent:

	2000	2001	2002	2003	2004
Institucions usuàries	13	17	15	15	16
Allotjament (A)	5	5	8	11	11
Hostatge web (W)	9	16	20	22	24
Hostatge de base de dades (BD)				2	8
Hostatge de domini (D)	10	15	19	77	81
Hostatge de correu (C)	7	7	15	14	19
Hostatge de llistes de distribució (L)	3	4	8	4	9
Servidors allotjats + hostatjats	5+13	5+17	8+23	11+82	11+88

Cal tenir en compte que 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 IX:

Les visites rebudes

Durant l'any 2004, el CESCA ha rebut 10 visites amb un total de 277 persones per familiaritzar-se amb les instal·lacions i serveis del Centre.

Data	Institució	Núm.
29-3	Centre d'estudis Sant Francesc	10
30-3	Taulé Viñas	32
31-3	La Salle Gràcia	40
13-4	Escuela Superior de Ingenieros de Sevilla	51
10-11 11-11 12-11	Setmana de la ciència	131
15-12	Màster de Seguretat ICT-esCERT	13

Annex X:

El sumari dels webs

Aquest annex recull el sumari de tres webs institucionals del CESCA: el del propi Centre (*www.cesca.es*), el del Punt Neutre d'Internet de Catalunya (*www.catnix.net*) i el del servei Tesis Doctorals en Xarxa (*www.tdx.cesca.es* i *tesisenred.net*).

1. Sumari del web *cesca.es*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gràf.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal <i>cesca.es</i>	RV, TV, XP	14-2-01	No	31-1-04	31-1-04	31-1-04
0.1	Plana d'entrada amb novetats més recents	RV,TV,XP	14-2-01	Sí	3-12-04	3-12-04	3-12-04
0.2	Menú de navegació	CF	14-2-01	Sí	22-12-03	22-12-03	11-2-04
0.3	Menú de canvi d'idioma i cerca al web	CF	14-2-01	Sí	14-2-01	14-2-01	14-2-01
1	Qui som?	MH, TV	11-2-97	No	14-6-04	14-6-04	14-6-04
1.1	Benvinguda	MH	19-3-97	Sí	4-5-04	4-5-04	4-5-04
1.2	Els òrgans de govern i assessors	MH	7-3-97	No	14-6-03	14-6-03	14-6-03
1.2.1	Direcció	MH, TV	31-7-97	Sí	20-10-04	20-10-04	20-10-04
1.2.1.1	Exdirectius	MH, XP, TV	31-7-97	Sí	20-10-04	20-10-04	20-10-04
1.2.2	Consell de Govern	CM	7-3-97	No	16-11-04	16-11-04	16-11-04
1.2.3	Comissió Permanent	CM	7-3-97	No	2-6-04	2-6-04	2-6-04
1.2.4	Comissió Executiva del CATNIX	CM	21-6-99	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04
1.2.5	CTAC	CM	5-6-97	No	19-11-04	19-11-04	19-11-04
1.2.6	GUSCF	CM	17-12-97	No	1-7-04	1-7-04	1-7-04
1.2.7	GUCAP	CM	5-4-00	No	16-11-04	16-11-04	16-11-04
1.2.8	CSIUC	CM	27-10-00	No	19-11-04	19-11-04	19-11-04
1.2.9	Comissió Tècnica del CATNIX	CM	21-6-99	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04
1.2.10	GTPD	CM	5-3-02	No	11-10-02	11-10-02	11-10-02
1.2.11	GTSEG	CM	24-10-03	No	9-12-04	9-12-04	9-12-04
1.2.12	GTSCD	CM	24-10-03	No	28-9-04	28-9-04	28-9-04
1.2.13	Recull de fotos	MH, TV	8-3-02	Sí	21-10-04	21-10-04	21-10-04
1.3	Els departaments	MH, CM	8-10-97	No	20-10-04	20-10-04	20-10-04
1.3.1	Recull de fotos	MH, TV, HP	8-3-02	Sí	19-2-03	19-2-03	19-2-03
1.3.2	Exemplets	MH	9-2-01	Sí	8-3-02	8-3-02	8-3-02
2	Supercomputació	JC	14-2-01	Sí	10-10-03	10-10-03	-
2.1	Què tenim?	MH, MM	22-4-96	No	21-1-05	21-1-05	-
2.1.1	Compiladors	JC	26-4-96	No	23-9-98	23-9-98	-
2.1.2	Llibreries	JC	25-4-96	No	23-9-98	23-9-98	-
2.1.3	Eines de desenvolupament	JC	26-4-96	No	22-9-98	22-9-98	-
2.1.4	Eines de visualització	JC	26-4-96	No	23-9-98	23-9-98	-
2.1.5	Aplicacions	JC	26-4-96	No	21-5-01	21-5-01	-
2.1.6	Visió històrica	JC	14-3-97	Sí	21-1-05	21-1-05	-
2.2	Sol·licitud de recursos	MH	29-4-96	No	16-6-04	16-6-04	16-6-04
2.3	Ús de recursos	MH	29-4-96	No	27-10-00	27-10-00	-
2.3.1	L'entorn bàsic de treball	JC	16-5-96	No	19-11-97	19-11-97	-
2.3.1.1	Els intèrprets de comandes <i>c-shell</i> i <i>k-shell</i>	JC	16-5-96	No	22-2-99	22-2-99	-
2.3.1.2	Obtenció d'informació	JC	9-5-96	No	23-2-99	23-2-99	-
2.3.1.3	Correu electrònic	JC	16-5-96	No	23-2-99	23-2-99	-
2.3.1.4	Comunicacions amb altres servidors	SM	7-5-96	No	7-5-96	7-5-96	-
2.3.1.5	Editors de text	JC	16-5-96	No	23-2-99	23-2-99	-
2.3.1.6	Algunes comandes bàsiques	JC	9-5-96	No	19-11-97	19-11-97	-
2.3.1.7	Ques de <i>batch</i>	JC	13-5-96	No	23-2-99	23-2-99	-
2.3.1.7.1	LoadLeveler	IB	3-5-96	No	5-5-99	23-2-99	-
2.3.1.7.2	Load Share Facility (LSF)	IB	23-2-99	No	2-4-02	2-4-02	-
2.3.1.7.3	NQE	JC	3-5-96	No	30-3-98	30-3-98	-

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
2.3.2	L'entorn de desenvolupament	JC	28-5-96	No	10-5-00	21-3-02	--
2.3.2.1	Eines de programació en FORTRAN	JC, MD	28-5-96	No	27-10-04	27-10-04	--
2.3.2.1.1	Adaptor 7.0 HPF	MM	10-11-00	Sí	10-11-00	10-11-00	--
2.3.2.2	Eines de programació en C	JC, MD	28-5-96	No	21-9-04	21-9-04	--
2.3.2.3	Eina de programació Java	MM	29-8-01	No	19-3-02	19-3-02	--
2.3.2.3.1	IBM Java Development Kit (JDK)	MM	13-5-99	No	13-5-99	--	--
2.3.2.3.2	HP-UX SDK	MM	25-1-01	No	11-4-02	11-4-02	--
2.3.2.3.3	Compaq J2SDK	MM	28-8-01	No	11-11-02	11-11-02	--
2.3.2.4	La utilitat <i>make</i>	JC	13-5-96	No	30-12-97	--	--
2.3.2.5	Desbrossament i anàlisi de programes	JC	14-5-96	No	23-2-99	--	--
2.3.2.5.1	Els visualitzadors vt i xpvm	SM	13-5-96	No	13-5-96	--	--
2.3.2.6	Les llibreries numèriques	JC	10-5-96	No	21-3-02	21-3-02	--
2.3.2.6.1	BLAS	SM	10-5-96	No	30-4-99	--	--
2.3.2.6.2	ESSL	IB	10-5-96	No	4-5-99	--	--
2.3.2.6.3	LAPACK	SM	10-5-96	No	30-4-99	--	--
2.3.2.6.4	MLIB	IB	30-4-99	No	30-4-99	--	--
2.3.2.6.5	NAG	JC	13-5-96	No	21-3-02	21-3-02	--
2.3.2.6.6	sgimath	SM	3-5-96	No	3-5-96	--	--
2.3.2.7	Les llibreries de paral·lelització	JC	10-9-96	No	10-5-00	--	--
2.3.2.7.1	Alguns conceptes bàsics	SM	13-9-96	No	13-9-96	--	--
2.3.2.7.2	BLACS	SM	10-9-96	No	10-9-96	--	--
2.3.2.7.3	BSPlib	JC	10-3-98	No	10-3-98	--	--
2.3.2.7.4	MPI	JC	12-9-96	No	10-5-00	--	--
2.3.2.7.4.1	Exemples d'execució de MPI en mode <i>batch</i>	IB	10-5-00	No	10-5-00	--	--
2.3.2.7.5	MPICH	JC	10-3-98	No	27-11-02	27-11-02	--
2.3.2.7.6	PARMACS	JC	10-9-96	No	10-5-00	--	--
2.3.2.7.7	PVM	JC	13-9-96	No	10-5-00	--	--
2.3.2.7.7.1	Exemples d'execució de PVM en mode <i>batch</i>	SM	13-9-96	No	13-9-96	--	--
2.3.2.8	Altres utilitats pel desenvolupament de programari	JC	14-5-96	No	2-9-99	--	--
2.3.3	Programari d'aplicacions	JC	3-5-96	No	11-5-04	11-5-04	--
2.3.3.1	ADF	IB, MD	17-7-96	No	25-10-04	25-10-04	--
2.3.3.2	AMBER	JC, MD	3-5-96	No	23-9-04	23-9-04	--
2.3.3.3	AutoDock	JC	11-5-04	No	11-5-04	11-5-04	--
2.3.3.4	Catalyst 4.7 - Servei Cerca Farmacòfors	JC	28-2-01	No	14-6-04	14-6-04	--
2.3.3.5	Crystal	JC	10-9-96	No	29-10-01	29-10-01	--
2.3.3.6	DeFT	JC	3-5-96	No	29-10-01	29-10-01	--
2.3.3.6.1	Exemples d'execució de DeFT en mode <i>batch</i>	JC	20-6-96	No	26-3-98	26-3-98	--
2.3.3.7	Dgauss	JC	5-5-96	No	29-10-01	29-10-01	--
2.3.3.8	GAMESS	JC	3-5-96	No	11-12-02	11-12-02	--
2.3.3.8.1	Exemples d'execució de GAMESS en mode <i>batch</i>	JC	12-6-96	No	19-1-99	19-1-99	--
2.3.3.9	Gaussian	JC, MD	21-5-97	No	25-10-04	25-10-04	--
2.3.3.9.1	Exemples d'execució de G98 en mode <i>batch</i>	JC, MD	12-6-96	No	22-10-04	22-10-04	--
2.3.3.9.2	Exemples d'execució de Gaussian amb partició del fitxer RWf en mode <i>batch</i>	IB	14-5-97	No	15-12-99	15-12-99	--
2.3.3.10	GAUSSRATE	IB	2-2-01	No	2-2-01	2-2-01	--
2.3.3.11	HONDO	SM	3-5-96	No	3-5-96	3-5-96	--
2.3.3.12	Ithaca	SM	3-5-96	No	3-5-96	3-5-96	--
2.3.3.13	Jaguar	JC	11-5-00	No	11-3-02	11-3-02	--
2.3.3.14	MINDO	JC	3-5-96	No	5-2-98	5-2-98	--
2.3.3.15	MOPAC	JC	5-6-96	No	22-1-98	22-1-98	--
2.3.3.15.1	Exemples d'execució de MOPAC en mode <i>batch</i>	JC	13-6-96	No	26-3-98	26-3-98	--
2.3.3.15.2	Utilitats del MOPAC	JC	5-6-96	No	4-12-97	4-12-97	--
2.3.3.16	POLYRATE	IB	2-2-01	No	2-2-01	2-2-01	--
2.3.3.17	PSHF-CIPSI	IB	18-11-97	No	27-11-97	27-11-97	--
2.3.3.18	UniChem	JC	3-5-96	No	22-5-01	22-5-01	--
2.3.3.19	YAeHMOP	SM	10-9-96	No	10-9-96	10-9-96	--
2.3.3.20	Objectivity/DB	MM	30-8-99	Sí	24-10-02	24-10-02	--
2.3.3.21	ORACLE	NM	25-6-97	No	7-3-00	7-3-00	--
2.3.3.22	NetPBM	MM	16-3-00	No	16-3-00	16-3-00	--
2.3.3.23	GrADS	MM	16-3-00	No	16-3-00	16-3-00	--
2.3.3.24	NCAR Graphics	IB	17-2-99	No	26-11-02	26-11-02	--
2.3.3.25	GNU Octave	IB	18-1-00	No	18-1-00	18-1-00	--
2.3.3.26	Veritas NetBackup	JC	12-5-00	Sí	12-5-00	12-5-00	--
2.3.4	L'entorn d'exploració	MM	7-5-96	No	22-10-04	22-10-04	--
2.3.4.1	Connexió al maquinari	JC	7-5-96	No	20-2-04	20-2-04	--
2.3.4.2	Àrees de treball	JC	7-5-96	No	16-2-04	16-2-04	--
2.3.4.3	Les cues de <i>batch</i> disponibles	JC	9-5-96	No	22-9-03	22-9-03	--
2.3.4.4	Obtenció del consum realitzat per projecte	JC	7-1-97	No	10-6-98	--	--
2.3.4.5	Limitacions en l'ús de recursos	JC	9-5-96	No	2-9-99	--	--
2.3.4.6	Política de <i>backups</i>	JC	9-5-96	No	22-10-04	22-10-04	--
2.3.5	<i>Benchmarks</i>	JC	6-3-01	No	23-9-03	23-9-03	--
2.3.6	Les preguntes més freqüents	JC	19-6-96	No	25-2-98	25-2-98	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
2.4	Els projectes	MH	18-7-96	No	6-3-02	6-3-02	-
2.4.1	Programes de mobilitat	MH	14-2-97	No	20-11-01	20-11-01	20-11-01
2.4.1.1	Cerca de visitants	Dpi	18-12-97	No	18-12-97	18-12-97	18-12-97
2.4.2	Centres de Supercomputació a Europa	AM	25-7-96	Sí	21-4-98	21-4-98	21-4-98
2.4.2.1	Alemanya	AM	9-8-98	Sí	-	-	5-10-98
2.4.2.2	Àustria	MT,TV	12-12-97	Sí	-	-	4-8-00
2.4.2.3	Bèlgica	MT	2-2-98	Sí	-	-	2-2-98
2.4.2.4	Dinamarca	MT	12-12-97	Sí	-	-	12-12-97
2.4.2.5	Eslovènia	MT	15-12-97	Sí	-	-	15-12-97
2.4.2.6	Espanya	TV	30-7-96	Sí	-	-	17-7-00
2.4.2.7	Finlàndia	MT	15-12-97	Sí	-	-	15-12-97
2.4.2.8	França	MT	15-12-97	Sí	-	-	5-10-98
2.4.2.9	Gran Bretanya	IB	12-2-98	Sí	-	-	3-7-98
2.4.2.10	Grècia	MT	2-1-98	Sí	-	-	2-1-98
2.4.2.11	Itàlia	IB	9-2-98	Sí	-	-	21-4-98
2.4.2.12	Noruega	MT	2-1-98	Sí	-	-	2-1-98
2.4.2.13	Països Baixos	MT	2-1-98	Sí	-	-	2-1-98
2.4.2.14	Portugal	MT	2-1-98	Sí	-	-	2-1-98
2.4.2.15	Suècia	MT	2-1-97	Sí	-	-	2-1-97
2.4.3	Projectes d'investigació	Dpi	18-12-97	No	18-12-97	18-12-97	18-12-97
2.4.4	Xarxa temàtica de Modelització Molecular	AM	27-11-97	No	15-10-98	16-10-98	-
2.5	Estadístiques	JC	23-5-97	Sí	3-9-04	3-9-04	-
2.5.1	1996	MH	10-3-97	Sí	10-3-97	6-3-02	-
2.5.2	1997	JC	23-5-97	Sí	20-1-98	6-3-02	-
2.5.3	1998	JC	23-5-97	Sí	4-9-98	6-3-02	-
2.5.4	1999	JC	23-5-97	Sí	19-1-00	6-3-02	-
2.5.5	2000	JC	23-5-97	Sí	11-12-00	6-3-02	-
2.5.6	2001	JC	23-5-97	Sí	20-3-02	20-3-02	-
2.5.7	2002	JC	23-5-97	Sí	31-1-03	31-1-03	-
2.5.8	2003	JC	24-5-97	Sí	25-2-04	25-2-04	-
3	Comunicacions	MIG, TV	1-3-01	Sí	8-3-04	8-3-04	8-3-04
3.0.1	L'allotjament i hostatge de servidors	MIG	1-3-01	No	27-7-04	27-7-04	-
3.1	Anella Científica	CP	8-7-96	Sí	27-12-04	27-12-04	27-12-04
3.1.1	Criteris d'adhesió	CP	23-3-04	No	23-3-04	23-3-04	-
3.1.2	Procediments d'adhesió	CP	31-3-04	No	27-12-04	27-12-04	-
3.1.2.1	Formulari de petició d'adreces IPv4	CP	31-3-04	No	26-10-04	-	-
3.1.2.2	Formulari de petició d'adreces IPv6	CP	31-3-04	No	26-10-04	-	-
3.1.2.3	Formulari de sol·licitud d'anunci de xarxes	CP	31-3-04	No	10-11-04	-	-
3.1.2.4	Formulari de sol·licitud de delegació de zona de DNS...	CP	31-3-04	No	31-3-04	-	-
3.1.3	Política d'ús	CP	23-3-04	Sí	23-3-04	23-3-04	-
3.1.4	Anella Científica DQDB	CP	15-7-96	Sí	1-3-01	1-3-01	1-3-01
3.1.5	Anella Científica ATM	CP	8-7-96	Sí	26-2-03	26-2-03	26-2-03
3.2	Serveis Addicionals de l'Anella Científica	MIG,CP,MIR,CF	12-2-98	Sí	3-2-05	3-2-05	-
3.2.1	Què és?	MR, IL	25-5-04	No	25-5-04	13-9-04	-
3.2.2	L'EC-UR	MR, IL	27-5-04	Sí	27-5-04	13-9-04	-
3.2.2.1	Sol·licitud de CPISR i CPIX	CP	4-5-04	Sí	4-5-04	-	-
3.2.2.2	Certificat de dades	CP	4-5-04	Sí	4-5-04	-	-
3.2.2.3	Sol·licitud de CDS	CP	4-5-04	Sí	4-5-04	-	-
3.2.2.4	Revocació dels CPISR i CPX	CP	4-5-04	Sí	4-5-04	-	-
3.2.2.5	Revocació de CDS	CP	4-5-04	Sí	4-5-04	-	-
3.2.3	Certificats	MR, IL	28-5-04	No	29-9-04	13-9-04	-
3.2.4	Documentació	MR, IL	8-6-04	No	17-12-04	17-12-04	-
3.2.5	Eines	MR, IL	11-3-04	No	29-11-04	29-11-04	-
3.2.6	PMF (FAQs)	MR, IL	4-6-04	No	29-9-04	29-9-04	-
3.2.7	Glossari	MR, IL	11-3-04	No	29-9-04	29-9-04	-
3.3	Nus de RedIRIS a Catalunya	CP, TV	2-7-96	Sí	8-3-04	8-3-04	8-3-04
3.4	Projectes	MIG	1-3-01	No	1-3-01	1-3-01	1-3-01
3.5	Estadístiques	MIG, RV	1-3-01	Sí	12-1-05	12-1-05	-
3.5.1	Estadístiques servidor news	MIG	28-2-01	No	28-2-01	28-2-01	-
3.5.2	1996	MH	27-2-97	Sí	23-10-01	23-10-01	-
3.5.3	1997	MH	27-2-97	Sí	23-10-01	23-10-01	-
3.5.4	1998	CP	27-2-97	Sí	23-10-01	23-10-01	-
3.5.5	1999	CP	27-2-97	Sí	23-10-01	23-10-01	-
3.5.6	2000	CP	27-2-97	Sí	23-10-01	23-10-01	-
3.5.7	2001	CP	13-2-02	Sí	13-2-02	13-2-02	-
3.5.8	2002	CP	1-3-01	Sí	15-1-03	15-1-03	-
3.5.9	2003	MIG, RV	1-3-01	Sí	15-1-04	15-1-04	-

Apartat	Tema	Autor	Ent. Gráf.	Català	Castellà	Anglès
4	Promoció	TV	14-2-01	Sí	17-5-04	17-5-04
4.1	Conferències	TV	12-1-04	No	19-11-04	19-11-04
4.1.1	1996	CG	10-5-96	Sí	22-4-97	22-4-97
4.1.2	1997	AM	10-5-96	Sí	9-7-97	9-7-97
4.1.3	1998	AM	10-5-96	Sí	21-12-98	21-12-98
4.1.4	1999	AM	10-5-96	Sí	12-1-00	12-1-00
4.1.5	2000	AM	10-5-96	Sí	22-12-00	22-12-00
4.1.6	2001	TV, RV	3-5-01	Sí	31-12-01	31-12-01
4.1.7	2002	TV	18-3-02	Sí	10-3-02	10-3-02
4.1.8	2003	MH, XP, HP	29-1-03	Sí	26-11-03	26-11-03
4.2	Aula de Noves Tecnologies	IL	26-11-04	Sí	11-1-05	11-1-05
4.2.1	1996	CG	25-4-97	Sí	25-4-97	25-4-97
4.2.2	1997	EA	29-4-97	Sí	7-11-97	7-11-97
4.2.3	1998	CG	15-5-98	Sí	15-5-98	15-5-98
4.2.4	1999	CG	15-5-98	Sí	15-5-98	15-5-98
4.2.5	2000	AM	18-10-99	Sí	10-4-00	10-4-00
4.2.6	2001	TV	14-2-01	Sí	18-9-01	18-9-01
4.2.7	2002	HP	4-10-02	Sí	4-10-02	4-10-02
4.2.8	2003	HP	4-10-02	Sí	13-6-03	13-6-03
4.2.9	2004	TV, IL	4-12-03	Sí	22-10-04	22-10-04
4.3	Jornades i seminaris	HP, TV	11-2-04	Sí	25-11-04	25-11-04
4.3.1	1996	MAN	6-5-96	Sí	6-5-96	--
4.3.2	1997	MT	6-5-96	Sí	11-12-97	--
4.3.3	1998	AM	21-12-98	Sí	21-12-98	--
4.3.4	1999	AM	6-4-99	Sí	6-4-99	--
4.3.5	2000	AM	25-2-00	Sí	23-10-00	--
4.3.6	2001	XP	8-5-01	Sí	19-11-01	19-11-01
4.3.7	2002	XP	13-3-02	Sí	5-11-02	05-11-02
4.3.8	2003	XP	6-5-03	Sí	17-12-03	17-12-03
4.4	Projectes	TV	14-2-01	No	28-1-02	28-1-02
4.4.1	HOISe-NM	TV	14-2-01	No	14-2-01	14-2-01
4.5	Estadístiques	TV	16-6-97	Sí	31-12-03	31-12-03
4.5.1	2000	AM,TV	17-6-97	Sí	10-5-00	10-5-00
4.5.2	2001	AM,TV	16-6-97	Sí	28-2-02	28-2-02
4.5.3	2002	TV	16-6-97	Sí	20-1-03	20-1-03
4.6	Teraflap 1994	MT	1998	No	1998	1998
4.7	Teraflap 1995	MT	1998	No	1998	1998
4.8	Teraflap 1996	MT	1998	No	1998	1998
4.9	Teraflap 1997	MT	1998	No	1998	1998
4.10	Teraflap 1998	MT	1999	Sí	1998	1998
4.11	Teraflap 1999	MT	1999	Sí	1999	1999
4.12	Teraflap 2000	TV	10-2-00	Sí	22-02-01	22-02-01
4.13	Teraflap 2001	TV	14-2-01	Sí	09-10-01	09-10-01
4.14	Teraflap 2002	TV	15-2-02	Sí	30-01-03	30-01-03
4.15	Teraflap 2003	TV	30-1-03	Sí	07-11-03	07-11-03
4.16	Teraflap 2004	TV	30-1-04	Sí	22-12-04	22-12-04
5	On som?	CG,RV	16-5-96	Sí	27-10-00	27-10-00
5.1	Ubicació a Barcelona	MH	16-5-96	Sí	14-06-00	14-06-00
5.2	Metro	CF	14-2-01	Sí	14-02-01	14-6-00
5.3	Restaurants	CF	14-2-01	No	14-02-01	14-6-00
6	Novetats	TV	3-4-02	No	3-4-02	3-4-02
6.1	1996	JC	18-7-96	Sí	8-1-97	--
6.1.1	04/03: Duplicada la potència del Cray	MAN	7-5-96	No	7-5-96	--
6.1.2	16/04: Nova configuració de l'ISP2	AM	22-4-96	No	22-4-96	--
6.1.3	22/04: 12 R10000 al CEPBA	MH	22-4-96	No	22-4-96	--
6.1.4	30/04: Noves tarifes per al CESCA	MH	22-4-96	No	22-4-96	--
6.1.5	12/06: Nous noms de les cues	SM	12-6-96	No	12-6-96	--
6.1.6	12/06: Trasllat del CESCA	MH	12-6-96	No	12-6-96	--
6.1.7	26/06: SP2: Duració treballs ampliada	SM	26-6-96	No	26-6-96	--
6.1.8	28/06: Conveni amb Oracle	MH	15-7-96	Sí	15-7-96	--
6.1.9	09/07: Tarifes per a 1996 i 1997	MH	17-7-96	No	17-7-96	--
6.1.10	15/07: Gaussian 94. Rev. D	AM	15-7-96	No	15-7-96	--
6.1.11	26/07: Conveni amb IBM	MH	10-9-96	Sí	10-9-96	--
6.1.12	09/09: Actualitzat el PowerChallenge	MH	10-9-96	No	10-9-96	--
6.1.13	12/09: Ampliació de disc a l'ISP2	MH	10-9-96	No	10-9-96	--
6.1.14	19/09: 8 nodes més per a ldisk i xdisk (SP2)	MH	19-9-96	No	19-9-96	--
6.1.15	19/09: Nova àrea d'scratch a l'ISP2	SM	19-9-96	No	19-9-96	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gràf.	Català	Castellà	Anglès
6.1.16	01/10: Ampliació d'UC concedides	MH	18-9-96	No	18-9-96	--	--
6.1.17	08/11: HPF al SP2 i a SGI	SM	8-11-96	No	12-11-96	--	--
6.1.18	29/11: Renovació de projectes	MH	29-11-96	No	29-11-96	--	--
6.1.19	04/12: HPF d'IBM també disponible a l'SP2	SM	4-12-96	No	4-12-96	--	--
6.1.20	05/12: AMBER 4.1 disponible arreu	SM	5-12-96	No	5-12-96	--	--
6.1.21	11/12: Noves cues paral·lel·les a l'SP2	SM	11-12-96	No	11-12-96	--	--
6.2	1997 CAP	JC	21-6-96	Sí	1999	1999	--
6.2.1	07/01: Canvis en l'SP2 <i>spscratch</i>	SM	7-1-97	No	7-1-97	7-1-97	--
6.2.2	07/01: Nova fórmula consum	MH	7-1-97	No	7-1-97	7-1-97	--
6.2.3	07/01: Formularis modificats	MH	7-1-97	No	7-1-97	7-1-97	--
6.2.4	03/03: L'Origin 2000 disponible	SM	3-3-97	No	3-3-97	3-3-97	--
6.2.5	06/03: Consells per als Prog. Mobilitat	MH	6-3-97	No	6-3-97	6-3-97	--
6.2.6	10/03: GCC disponible a l'SP2	SM	10-3-97	No	10-3-97	10-3-97	--
6.2.7	11/03: Consulta de manuals on-line a l'SP2	SM	11-3-97	No	11-3-97	11-3-97	--
6.2.8	12/03: Nova opció de la comanda consum	MM	12-3-97	No	4-12-97	19-11-97	--
6.2.9	20/03: Hores CIRIT disponibles	MH	20-3-97	No	4-12-97	4-12-97	--
6.2.10	04/04: Gaussian 94 Rev.1	SM	4-4-97	No	4-4-97	4-4-97	--
6.2.11	22/04: Actualització de software a l'SP2	SM	22-4-97	No	22-4-97	22-4-97	--
6.2.12	02/05: Actualització de hardware a l'SP2	SM	2-5-97	No	13-5-97	13-5-97	--
6.2.13	08/05: Formularis actualitzats	SM	8-5-97	No	8-5-97	8-5-97	--
6.2.14	08/05: Descripció de projectes	SM	8-5-97	No	8-5-97	21-5-97	--
6.2.15	20/05: ADF a l'SP2	SM	20-5-97	Sí	20-5-97	20-5-97	--
6.2.16	21/05: Més disc a l'SP2	SM	21-5-97	No	21-5-97	21-5-97	--
6.2.17	21/05: Nova versió de GAMESS	SM	22-5-97	No	22-5-97	22-5-97	--
6.2.18	30/05: 32 processadors més per a l'O2000	SM	30-5-97	No	30-5-97	30-5-97	--
6.2.19	03/06: 30 GB més de disc per al CRAY	MH	3-6-97	No	3-6-97	3-6-97	--
6.2.20	27/06: Nova tarifa per al CRAY	MH	27-6-97	No	27-6-97	27-6-97	--
6.2.21	03/07: L'espai en disc no es comptabilitza	JC	3-7-97	No	3-7-97	3-7-97	--
6.2.22	18/09: Accés a l'Origin 2000	MM	18-9-97	No	18-9-97	18-9-97	--
6.2.23	10/10: Convocatòria de projectes per al 1998	MH	10-10-97	No	10-10-97	10-10-97	--
6.2.24	20/11: 14 nodes més a la cua 'paralel'	MM	20-11-97	No	20-11-97	20-11-97	--
6.2.25	26/11: Aturada del Cray Y-MP	JC	26-11-97	No	26-11-97	26-11-97	--
6.3	1997 COM	CP	17-7-96	No	18-8-97	17-4-01	--
6.3.1	18/05: Universitat de Lleida	CP	18-4-97	No	18-4-97	18-4-97	--
6.3.2	26/06: Centre de Física de Benasque	CP	26-6-97	Sí	26-6-97	26-6-97	--
6.3.3	09/07: Millora de la connexió amb el CIGCAT	CP	9-7-97	Sí	9-7-97	9-7-97	--
6.3.4	22/07: Noves estadístiques	CP	22-7-97	Sí	22-7-97	22-7-97	--
6.3.5	18/08: El Joan XXIII a l'Anella	CP	10-10-97	No	10-10-97	10-10-97	--
6.3.6	12/11: El catàleg del CBUC es trasllada al CESCA	CP	14-11-97	No	14-11-97	14-11-97	--
6.3.7	01/12: Nou servei de News al CESCA	MIG	1-12-97	S	1-12-97	1-12-97	--
6.3.8	09/12: L'INEFC de Lleida es connecta a l'Anella	CP	9-12-97	S	9-12-97	9-12-97	--
6.3.9	25/11: La UB es connecta directament al CESCA	CP	25-11-97	Sí	25-11-97	25-11-97	--
6.3.10	15/12: Nou radioenllaç per a la UdG, la URV i la UdL	CP	5-12-97	Sí	15-12-97	15-12-97	--
6.3.11	17/12: La UPC també es connecta al CESCA	CP	17-12-97	Sí	17-12-97	17-12-97	--
6.4	1998 CAP	JC	1998	Sí	1998	1998	--
6.4.1	02/01: Cerca Programes de Mobilitat de la UE	AM	2-1-98	No	2-1-98	2-1-98	--
6.4.2	19/01: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	19-1-98	No	19-1-98	19-1-98	--
6.4.3	29/01: Unichem 4.0 disponible	JC	29-1-98	No	29-1-98	29-1-98	--
6.4.4	01/02: Oracle 8.0 disponible	OM	1-2-98	No	1-2-98	1-2-98	--
6.4.5	02/02: Història de la fórmula consum	MH	2-2-98	No	2-2-98	2-2-98	--
6.4.6	18/02: Consells per als Programes de Mobilitat	MH	6-3-97	No	18-2-98	17-11-98	--
6.4.7	02/03: Utilitat flex disponible al SP2	JC	2-3-98	No	2-3-98	2-3-98	--
6.4.8	02/03: BSPlib disponibles al SP2	JC	2-3-98	No	2-3-98	2-3-98	--
6.4.9	02/03: MPICH disponible a l'SP2	JC	2-3-98	No	2-3-98	2-3-98	--
6.4.10	04/03: Intelligent Miner a disposició dels usuaris	Dpi	4-3-98	No	4-3-98	4-3-98	--
6.4.11	13/03: Nova tarifa per a la CIRIT	MH	13-3-98	No	13-3-98	13-3-98	--
6.4.12	21/04: IBM discontinua el PVMe	JC	21-4-98	No	21-4-98	21-4-98	--
6.4.13	29/04: Autoconf, m4 i info de GNU a l'SP2	JC	29-4-98	No	29-4-98	29-4-98	--
6.4.14	07/05: Als usuaris de l'Origin2000	JL, (CEPBA)	7-5-98	No	7-5-98	7-5-98	--
6.4.15	08/05: Nou equipament adquirit	MH,JC	8-5-98	No	8-5-98	8-5-98	--
6.4.16	03/06: Disponibilitat del SP2 i el V2250	JC	3-6-98	No	3-6-98	30-6-98	--
6.4.17	22/06: Canvi en la gestió del Pool9 a l'SP2	JC	22-6-98	No	22-6-98	22-6-98	--
6.4.18	30/06: L'O2000 i l'SP2 s'actualitzen	JC	30-6-98	No	30-6-98	30-6-98	--
6.4.19	31/07: Posada en servei del V2250	JC	31-7-98	No	31-7-98	31-7-98	--
6.4.19.1	31/07: HP Exempler V2250: Guia de l'usuari	JC	31-7-98	No	31-7-98	31-7-98	--
6.4.20	01/09: Convocatòria de projectes per al 1999	MM	16-9-98	No	16-9-98	16-9-98	--
6.4.21	22/09: Noves utilitats a l'HP V2250	JC	22-9-98	No	22-9-98	22-9-98	--
6.4.22	23/09: L'SP2 sincronitza els rellotges amb l'NTP	JC	23-9-98	No	23-9-98	23-9-98	--
6.4.23	11/11: Nova àrea d' <i>scratch</i> // <i>hpscratch</i> a l'HP V2250	JC	11-11-98	No	11-11-98	11-11-98	--
6.4.24	23/11: Gaussian 98 disponible	JC	23-11-98	No	23-11-98	23-11-98	--
6.4.25	03/12: L'HP V2250 plenament operatiu	JC	3-12-98	No	3-12-98	3-12-98	--

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
6.5	1998 COM	CP	1998	No	1998	1998	-
6.5.1	27/04: Ampliació contracte de Telefónica	CP	27-4-98	No	27-4-98	27-4-98	-
6.5.2	29/05: La nova Anella Científica és ja operacional	MIG	29-5-98	No	29-5-98	29-5-98	-
6.5.3	01/07: Centre de Física de Benasque	MIG	1-7-98	Si	1-7-98	1-7-98	-
6.5.4	08/07: L'H.G.V canvia la seva connexió a l'A.C	CP	8-7-98	Si	8-7-98	8-7-98	-
6.5.5	01/09: El TERMCAT millora la seva connectivitat	CP	1-9-98	No	1-9-98	1-9-98	-
6.5.6	01/09: Serveis addic. de l'A.C; proxy-caché i ftp mirror	CP	1-9-98	No	1-9-98	1-9-98	-
6.5.7	15/09: La RACAB es connecta a la Xarxa	MIG	15-9-98	No	15-9-98	15-9-98	-
6.5.8	15/10: La UB es connecta amb ATM a 155 Mbps	CP	15-10-98	No	15-10-98	15-10-98	-
6.5.9	19/10: Augmenta l'enllaç amb els EUA	CP	19-10-98	No	19-10-98	19-10-98	-
6.5.10	05/11: La UPC es connecta amb ATM a 155 Mbps.	CP	5-11-98	No	5-11-98	5-11-98	-
6.5.11	21/12: L'XTEC a l'Anella Científica	CP	21-12-98	No	21-12-98	21-12-98	-
6.6	1999 CAP	JC	1999	No	1999	1999	-
6.6.1	12/01: Consells per als Programes de Mobilitat	MH	6-3-97	No	12-1-99	12-1-99	-
6.6.2	13/01: UniChem 4.1 accessible	JC	13-1-99	No	13-1-99	13-1-99	-
6.6.3	14/01: Documentació en format HTML en l'SP2	JC	6-3-97	No	14-1-99	14-1-99	-
6.6.4	19/01: Nova versió de GAMESS	JC	19-1-99	No	19-1-99	19-1-99	-
6.6.5	21/01: Nou algorisme per balancejar la càrrega batch	JC	21-1-99	No	21-1-99	21-1-99	-
6.6.6	21/01: Jaguar disponible a l'IHP	JC	21-1-99	No	21-1-99	21-1-99	-
6.6.7	12/02: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	12-2-99	No	12-2-99	12-2-99	-
6.6.8	15/02: Catalyst 4.0 disponible	JC	15-2-99	No	15-2-99	15-2-99	-
6.6.9	17/02: NCAR Graphics instal·lat	JC	17-2-99	No	17-2-99	17-2-99	-
6.6.10	22/02: Actualització de les NAG: Mark18	JC	22-2-99	No	22-2-99	22-2-99	-
6.6.11	04/03: MARC disponible a l'IHP	JC	4-3-99	No	4-3-99	4-3-99	-
6.6.12	11/03: Gaussian98 fins a 2GB a l'IHP	JC	11-3-99	No	11-3-99	11-3-99	-
6.6.13	13/03: Oferta de treball per Assistència tècnica	JC	15-3-99	No	15-3-99	17-9-99	-
6.6.14	19/04: CASTEP disponible a l'IBM SP2	JC	19-4-99	No	19-4-99	19-4-99	-
6.6.15	03/05: Adaptor 6.1 a l'IBM SP2 i a l'IHP V2250	JC	3-5-99	No	3-5-99	3-5-99	-
6.6.16	03/05: 32 nodes a la cua 'paralel' de l'IBM SP2	JC	3-5-99	No	3-5-99	3-5-99	-
6.6.17	26/04: Bancs de memòria defectuosos a l'IHP V2250	JC	26-4-99	No	6-5-99	6-5-99	-
6.6.18	25/03: Upgrade de l'IHP V2250 amb el patch	JC	25-3-99	No	25-3-99	6-5-99	-
6.6.19	13/05: IBM JDK 1.1.6 instal·lat a l'IBM SP2	JC	13-5-99	No	13-5-99	13-5-99	-
6.6.20	14/05: Oracle Developer/2000 instal·lat a l'IBM SP2	JC	14-5-99	No	14-5-99	14-5-99	-
6.6.21	16/06: GAMESOL disponible a l'IBM i a l'IHP	JC	16-6-99	No	16-6-99	16-6-99	-
6.6.22	24/08: Llibreries OpenGL instal·lades a l'IBM SP2	JC	24-8-99	No	24-8-99	24-8-99	-
6.6.23	30/08: Objectivity/DB C++ & Java Database Developer 5.1	JC	30-8-99	No	30-8-99	30-8-99	-
6.6.24	30/08: Correccions Y2K a l'IHP V2250	JC	30-8-99	No	30-8-99	30-8-99	-
6.6.25	30/08: HP V2250 configurat com a <i>Trusted System</i>	JC	30-8-99	No	30-8-99	30-8-99	-
6.6.26	02/09: Manuals en línia a l'IHP V2250	JC	2-9-99	No	2-9-99	2-9-99	-
6.6.27	02/09: PGPILOT disponible a l'IBM SP2	JC	2-9-99	No	2-9-99	2-9-99	-
6.6.28	15/09: Convocatòria de projectes per al 2000	JC	15-9-99	No	15-9-99	15-9-99	-
6.6.29	20/09: Nou equipament al CESCA	JC	20-9-99	No	4-11-99	4-11-99	-
6.6.30	28/09: L'N4000 en fase de proves	JC	28-9-99	No	28-9-99	28-9-99	-
6.6.31	07/10: Nova cua free	JC	7-10-99	No	7-10-99	7-10-99	-
6.6.32	22/11: Nova versió del GCC	JC	22-11-99	No	22-11-99	22-11-99	-
6.6.33	30/11: Amber 50 disponible a totes les màquines	JC	30-11-99	No	30-11-99	30-11-99	-
6.6.34	14/12: Gaussian 98 Rev. A.7 disponible	JC	14-12-99	No	14-12-99	14-12-99	-
6.7	1999 COM	CP	1999	No	1999	1999	-
6.7.1	14/01: La Salle i l'ICS es passen a la fibra	CP	14-1-99	No	14-1-99	14-1-99	-
6.7.2	26/02: Noves estadístiques del servidor Proxy	MIG	26-2-99	No	26-2-99	26-2-99	-
6.7.3	12/03: Noves estadístiques del servidor de News	CP	12-3-99	Si	12-3-99	12-3-99	-
6.7.4	15/04: L'IB es connecta a la Xarxa Científica	CP	16-4-99	Si	16-4-99	16-4-99	-
6.7.5	04/05: La fibra òptica arriba a la UAB	CP	27-5-99	Si	27-5-99	27-5-99	-
6.7.6	06/05: El CIGCSA es passa a la fibra	CP	12-5-99	No	12-5-99	12-5-99	-
6.7.7	04/06: Tres institucions, operatives al punt neutre	CP	4-6-99	No	4-6-99	4-6-99	-
6.7.8	23/06: El SCS incrementa la seva connexió a 2Mbps	CP	23-6-99	Si	23-6-99	23-6-99	-
6.7.9	04/07: Centre de Física de Benasque	CP	7-7-99	Si	7-7-99	7-7-99	-
6.7.10	09/07: L'IRTA augmenta la seva connexió	CP	9-7-99	Si	9-7-99	9-7-99	-
6.7.11	15/07: Noves institucions connectades al CATNIX	CP	20-7-99	No	20-7-99	20-7-99	-
6.7.12	16/07: Ampliació de la línia directa amb als EUA	CP	16-7-99	No	16-7-99	16-7-99	-
6.7.13	22/09: Ampliació serveis FTP anònim i proxy-cache	CP	21-9-99	No	21-9-99	21-9-99	-
6.7.14	28/09: ESADE augmenta la seva connexió	CP	28-9-99	Si	28-9-99	28-9-99	-
6.7.15	22/10: Nou servidor amb línia directa als EUA	CP	22-10-99	No	22-10-99	22-10-99	-
6.7.16	23/11: L'Abadia de Montserrat, nova incorporació	CP	23-11-99	Si	23-11-99	23-11-99	-
6.7.17	25/11: El CCGC modifica la seva connexió	CP	1-12-99	No	1-12-99	1-12-99	-
6.7.18	23/12: 53 institucions connectades a l'AC	CP	23-12-99	No	23-12-99	23-12-99	-
6.7.19	23/12: La UdG millora la seva connexió	CP	23-12-99	Si	23-12-99	23-12-99	-

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
6.8	2000 CAP	JC	2000	Sí	2000	2000	
6.8.1	4/1: Convocatòria d'hores CIRIT	MH	18-1-00	No	18-1-00	18-1-00	-
6.8.2	18/1: Nova versió de gmake a l'IBM SP2	JC	18-1-00	No	18-1-00	18-1-00	-
6.8.3	18/1: Octave 2.0.15 a l'IBM SP2	JC	18-1-00	No	18-1-00	18-1-00	-
6.8.4	20/1: Nova versió de Perl a les HP	JC	20-1-00	No	20-1-00	20-1-00	-
6.8.5	18/2: Acord CESCA-CESGA-CICA	MH	18-2-00	No	18-2-00	18-2-00	-
6.8.6	17/2: Editor emacs disponible a les HP	JC	17-2-00	No	17-2-00	17-2-00	-
6.8.7	23/2: Oracle8 a l'IBM SP2	JC	23-2-00	No	23-2-00	23-2-00	-
6.8.8	28/2: AMBER 6.0 disponible	JC	28-2-00	No	28-2-00	28-2-00	-
6.8.9	3/3: Concessió hores CIRIT	MH	3-3-00	No	3-3-00	3-3-00	-
6.8.10	7/3: Oracle8 a les HP	JC	7-3-00	No	7-3-00	7-3-00	-
6.8.11	10/3: Consells per sol·licitar estància als P.Mob.	MH	6-3-97	No	20-11-01	20-11-01	-
6.8.12	8/3: HP discontinua el FORTRAN 77	JC	8-3-00	No	8-3-00	8-3-00	-
6.8.13	16/3: GrADS 1.7 i NetPBM 7 a l'IBM SP2	JC	16-3-00	No	16-3-00	16-3-00	-
6.8.14	16/3: VCG i Graphviz a les HP	JC	16-3-00	No	16-3-00	16-3-00	-
6.8.15	16/3: Td i Tk 8.0.3 disponibles a les HP	JC	16-3-00	No	16-3-00	16-3-00	-
6.8.16	31/3: Java 2 instal·lat a HP V2500/N4000	JC	31-3-00	No	31-3-00	31-3-00	-
6.8.17	3/4: Convocatòria d'hores per a CESGA i CICA	MH	3-4-00	No	3-4-00	3-4-00	-
6.8.18	11/4: Seguretat i nova UMASK	JC	11-4-00	No	11-4-00	11-4-00	-
6.8.19	12/4: Nova versió 5.2.1 d'Objectivity/DB	JC	12-4-00	No	12-4-00	12-4-00	-
6.8.20	11/5: Jaguar 4.0 disponible a l'HP V2500	JC	11-5-00	No	11-5-00	11-5-00	-
6.8.21	15/5: Concessió d'hores per al CESGA i el CICA	JC	15-5-00	No	15-5-00	15-5-00	-
6.8.22	19/5: Hores usades a l'IBM SP2	MH	19-5-00	No	19-5-00	19-5-00	-
6.8.23	7/6: Secure Shell a l'IBM SP2 i les HP	JC	7-6-00	No	7-6-00	7-6-00	-
6.8.24	29/9: Convocatòria de projectes per al 2001	MH	15-9-00	No	27-10-00	27-10-00	-
6.8.25	7/9: Oferta d'una plaça per un curs de SUN al CESGA	JC	7-9-00	No	7-9-00	7-9-00	-
6.8.26	24/10: Molden 3.6 disponible	JC	24-10-00	No	24-10-00	24-10-00	-
6.8.27	24/10: Nova versió de f90 a les HP	JC	24-10-00	No	24-10-00	24-10-00	-
6.8.28	25/10: Password Cracker v5.0	JC	25-10-00	No	25-10-00	25-10-00	-
6.8.29	26/10: ADF2000 disponible a l'IBM SP2	JC	26-10-00	No	26-10-00	26-10-00	-
6.8.30	10/11: Nova versió ADAPTOR 7.0 a les HP	JC	10-11-00	Sí	10-11-00	10-11-00	-
6.8.31	01/12: Gaussian 98 Rev A.9 disponible	JC	1-12-00	No	1-12-00	1-12-00	-
6.8.32	12/12: Nova Feature "Disc 12 Gb" a l'IBM SP2	JC	12-12-00	No	12-12-00	12-12-00	-
6.8.33	20/10: D Zentralblatt MATH replicada al CESCA	JC	20-12-00	No	20-12-00	20-12-00	-
6.8.34	29/12: MySQL disponible a HP	JC	29-12-00	No	29-12-00	29-12-00	-
6.9	2000 COM	MIG	2000	Sí	2000	2000	
6.9.1	4/1: L'HSP augmenta la seva velocitat	CP	4-1-00	Sí	4-1-00	4-1-00	-
6.9.2	21/2: L'IEC modifica la seva connexió	CP	21-2-00	Sí	21-2-00	21-2-00	-
6.9.3	2/3: La URV millora la seva connexió	CP	2-3-00	Sí	2-3-00	2-3-00	-
6.9.4	7/3: L'EUSS augmenta la seva velocitat d'accés	CP	7-3-00	Sí	7-3-00	7-3-00	-
6.9.5	23/3: L'ICC modifica la seva connexió	CP	23-3-00	Sí	23-3-00	23-3-00	-
6.9.6	24/3: La FCDP es connecta a l'AC	CP	31-3-00	Sí	31-3-00	31-3-00	-
6.9.7	3/4: La UdL millora la seva connexió a l'AC	CP	3-4-00	Sí	7-4-00	7-4-00	-
6.9.8	24/5: BT Telecomunicacions, operatiu al CATNIX	CP	25-5-00	Sí	25-5-00	25-5-00	-
6.9.9	29/5: Es busca tècnic de comunicacions	CP	29-5-00	No	29-5-00	29-5-00	-
6.9.10	4/6: 1er. aniversari del CATNIX	MH	4-6-00	Sí	4-6-00	4-6-00	-
6.9.11	30/6: Centre de Ciències de Benasc	CP	4-6-00	Sí	4-6-00	4-6-00	-
6.9.12	4/9: Nou servidor de News al CESCA	CP	4-9-00	Sí	4-9-00	4-9-00	-
6.9.13	28/9: La UIB s'agermana al nostre proxy	CP	2-10-00	Sí	2-10-00	2-10-00	-
6.9.14	10/10: L'Institut de Geomètica s'incorpora a l'AC	CP	10-10-00	Sí	10-10-00	10-10-00	-
6.9.15	27/10: El CDES Abat Oliba, nova alta a l'AC	CP	27-10-00	Sí	27-10-00	27-10-00	-
6.10	2001	CP	2001	Sí	2001	2001	
6.10.1	Gener 2001	JC, MH, TV	12-1-01	No	31-1-01	31-1-01	-
6.10.2	Febrer 2001	IB, JC, TV, MH	1-2-01	No	28-2-01	28-2-01	-
6.10.3	Març 2001	TV	2-3-01	No	23-3-01	23-3-01	-
6.10.4	Abril 2001	CP, JC, TV	17-4-01	No	27-4-01	27-4-01	-
6.10.5	Maig 2001	JC, MH, TV	3-5-01	No	31-5-01	31-5-01	-
6.10.6	Juny 2001	JC, TV	6-6-01	No	18-6-01	18-6-01	-
6.10.7	Juliol 2001	JC, TV	2-7-01	No	24-7-01	24-7-01	-
6.10.8	Agost 2001	JC, TV	1-8-01	No	31-8-01	31-8-01	-
6.10.9	Setembre 2001	TV	13-9-01	No	19-9-01	19-9-01	-
6.10.10	Octubre 2001	JC, MR, TV	1-10-01	No	30-10-01	30-10-01	-
6.10.11	Novembre 2001	JC, TV	6-11-01	No	28-11-01	28-11-01	-
6.10.12	Desembre 2001	IB, JC, TV, MC	5-12-01	No	28-12-01	28-12-01	-

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gräf.	Català	Castellà	Anglès
6.11	2002	TV	2002	No	2002	2002	-
6.11.1	Gener 2002	JC, TV, CM	3-1-02	No	28-1-02	28-1-02	-
6.11.2	Febrer 2002	MH, CP, TV, JC	13-2-02	No	28-2-02	28-2-02	-
6.11.3	Març 2002	TV	5-3-02	No	25-3-02	25-3-02	-
6.11.4	Abril 2002	MH, TV, CM	2-4-02	No	26-4-02	26-4-02	-
6.11.5	Mai 2002	TV	7-5-02	No	28-5-02	28-5-02	-
6.11.6	Juny 2002	TV, MM	1-6-02	No	26-6-02	26-6-02	-
6.11.7	Juliol 2002	CM, IB, TV	3-7-02	No	13-1-03	13-1-03	-
6.11.8	Agost 2002	MM	23-8-02	No	23-8-02	23-8-02	-
6.11.9	Setembre 2002	JC, IB, TV	2-9-02	No	27-9-02	27-9-02	-
6.11.10	Octubre 2002	XP, JC	1-10-02	No	31-10-02	31-10-02	-
6.11.11	Novembre 2002	HP, TV, JC	1-11-02	No	29-11-02	29-11-02	-
6.11.12	Desembre 2002	JC, XP	11-12-02	No	30-12-02	30-12-02	-
6.12	2003	TV	2003	No	2003	2003	-
6.12.1	Gener 2003	XP	21-1-03	No	30-1-03	30-1-03	-
6.12.2	Febrer 2003	MH, JC	10-2-03	No	27-2-03	27-2-03	-
6.12.3	Març 2003	HP	12-3-03	No	12-3-03	12-3-03	-
6.12.4	Abril 2003	MH, HP	3-4-03	No	23-4-03	23-4-03	-
6.12.5	Mai 2003	JC, HP, MM, TV	7-5-03	No	28-5-03	28-5-03	-
6.12.6	Juny 2003	TV	10-6-03	No	30-6-03	30-6-03	-
6.12.7	Juliol 2003	TV	4-7-03	No	25-7-03	25-7-03	-
6.12.8	Agost 2003	TV	4-8-03	No	4-8-03	4-8-03	-
6.12.9	Setembre 2003	MH, TV	8-9-03	No	22-9-03	22-9-03	-
6.12.10	Octubre 2003	JC, IB, TV	1-10-03	Si	30-10-03	30-10-03	-
6.12.11	Novembre 2003	TV	15-9-03	No	15-9-03	15-9-03	-
6.12.12	Desembre 2003	TV	4-12-03	No	30-12-03	30-12-03	-
6.13	2004	TV	2004	No	2004	2004	-
6.13.1	Gener 2004	JC, TV	13-1-04	No	30-1-04	30-1-04	-
6.13.2	Febrer 2004	MH, JC, HP	4-2-04	No	26-2-04	26-2-04	-
6.13.3	Març 2004	MH, TV	3-3-04	No	31-3-04	31-3-04	-
6.13.4	Abril 2004	TV	29-4-04	No	30-4-04	30-4-04	-
6.13.5	Mai 2004	JC, TV	6-5-04	No	18-5-04	18-5-04	-
6.13.6	Juny 2004	JC, TV	2-6-04	No	29-6-04	29-6-04	-
6.13.7	Juliol 2004	TV	28-7-04	No	29-7-04	29-7-04	-
6.13.8	Setembre 2004	JC, TV, MD	1-9-04	No	22-9-04	22-9-04	-
6.13.9	Octubre 2004	MH, JC, TV, IL	1-10-04	No	27-10-04	27-10-04	-
6.13.10	Novembre 2004	MH, TV, IL	1-11-04	No	29-11-04	29-11-04	-
6.13.11	Desembre 2004	MH, TV	13-12-04	No	27-12-04	27-12-04	-
7	Agenda	XP	2-12-03	Si	13-12-04	13-12-04	13-12-04
7.1	1997	CG	10-5-96	Si	9-7-97	9-7-97	-
7.2	1998	AM	10-5-96	Si	9-7-97	9-7-97	-
7.3	1999	AM	10-5-96	Si	20-1-99	20-1-99	-
7.4	2000	AM	10-5-96	Si	22-12-00	22-12-00	-
7.5	2001	TV, XP	7-3-01	Si	14-12-01	14-12-01	14-12-01
7.6	2002	XP	7-3-01	Si	20-11-02	20-11-02	20-11-02
7.7	2003	XP	18-12-02	Si	31-12-03	31-12-03	31-12-03
7.8	2005	TV	30-11-04	Si	23-12-04	23-12-04	23-12-04
8	Enllaços d'interès	XP, IL	14-6-00	No	27-12-04	27-12-04	27-12-04
9	Estadístiques del web	NM	2-3-01	Si	2-3-01	2-3-01	2-3-01
10	Mapa del web	RV	14-2-01	Si	28-5-04	28-5-04	28-5-04
11	Modificacions en el web	RV	14-2-01	No	23-12-04	23-12-04	23-12-04
12	Nadales	MD	2004	Si	2004	2004	2004
12.1	2001	CF	2001	Si	2001	2001	2001
12.2	2002	SM	2002	Si	2002	2002	2002
12.3	2003	MT	2003	Si	2003	2003	2003
12.4	2004	MD	2004	Si	2004	2004	2004

2. Sumari del web *catnix.net*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castella	Anglès
0	Pàgina principal <i>catnix.net</i>	RV	26-7-99	Sí	4-1-05	4-1-05	4-1-05
0.1	Menú de seccions	CG	26-7-99	Sí	12-7-04	12-7-04	12-7-04
0.2	Menú de navegació	RV	26-7-99	Sí	12-3-04	--	--
1	Qui som?						
1.1	Benvinguda	MP	26-7-99	Sí	22-12-03	22-12-03	22-12-03
1.2	Els participants	MH, TV	26-7-99	Sí	3-12-04	3-12-04	3-12-04
1.3	Els òrgans de govern	MH, TV	26-7-99	No	2-9-02	2-9-02	2-9-02
2	Els serveis						
2.1	Infraestructura tècnica	CP, MR	26-7-99	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04
2.2	Requeriments de connexió	MH	7-4-99	No	12-12-01	12-12-01	12-12-01
2.3	Estadístiques	CP	12-1-00	Sí	23-12-04	23-12-04	23-12-04
2.3.1	Tràfic intercanviat	MR	30-1-00	Sí	10-12-03	--	--
2.3.2	Prefixos xarxes anunciades per l'AC	MR	30-1-00	Sí	30-1-00	--	--
2.3.3	Prefixos xarxes anunciades per al-pi	MR	30-1-00	Sí	30-1-00	--	--
2.3.4	Prefixos xarxes anunciades per Auna	MR	30-1-00	Sí	30-1-00	--	--
2.3.5	Prefixos xarxes anunciades per Sarenet	MR	30-1-00	Sí	30-1-00	--	--
2.3.6	Prefixos xarxes anunciades per Acens	MR	30-6-03	Sí	30-6-03	--	--
2.3.7	Prefixos xarxes anunciades per BT	MR	24-5-00	Sí	24-5-00	--	--
2.3.8	Prefixos xarxes anunciades per Jazztel	MR	3-5-00	Sí	3-5-00	--	--
2.3.9	Prefixos xarxes anunciades per Colt Telecom	MR	2-8-01	Sí	2-8-01	--	--
2.3.10	Prefixos xarxes anunciades per Easynet	MR	17-9-01	Sí	17-9-01	--	--
2.3.11	Prefixos xarxes anunciades per Vodafone	MR	30-12-03	Sí	30-12-03	--	--
2.3.12	Prefixos xarxes anunciades per Telefónica-Data	MR		Sí	21-12-01	--	--
2.3.13	Prefixos xarxes anunciades per Adam	MR	30-12-03	Sí	30-12-03	--	--
2.3.14	Prefixos xarxes anunciades per Nexica	MR	30-12-03	Sí	30-12-03	--	--
2.3.15	Prefixos xarxes anunciades per Altecocom	MR	30-12-03	Sí	30-12-03	--	--
2.3.16	Prefixos xarxes anunciades per T-Systems	MR	13-10-04	Sí	13-10-04	--	--
2.3.17	Prefixos xarxes anunciades per Kaos	MR	13-10-04	Sí	13-10-04	--	--
2.4	Looking Glass	MR	17-10-01	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04
2.5	Novetats	CP, TV, HP	26-7-99	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04
2.6	Suggeriments	CP	26-7-99	No	26-7-99	26-7-99	26-7-99
3	On som ?						
3.1	Localització	MH, TV	26-7-99	Sí	2-9-02	2-9-02	2-9-02
3.2	Enllaços d'interès	TV, HP	26-7-99	No	13-12-04	13-12-04	13-12-04

3. Sumari del web *tdx.cesca.es*

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
0	Pàgina principal <i>tdx.cesca.es</i>	MN	19-5-04	Sí	19-5-04	19-5-04	19-5-04
0.1	Menú de seccions	MN	19-5-04	No	19-5-04	19-5-04	19-5-04
0.2	Menú de navegació	MN	19-5-04	Sí	19-11-04	19-11-04	19-11-04
1	Què és?	MH, SR	21-5-04	No	21-5-04	21-5-04	21-5-04
2	Cerca	MN	19-5-04	Sí	19-11-04	19-11-04	19-11-04
3	Estadístiques	MN					
3.1	Tesis incorporades per universitat	MN	17-11-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.2	Tesis distribuïdes per matèria i universitat	MN	5-11-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.3	Tesis consultades de cada universitat	MN	4-10-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.4	Accessos a fitxers PDF de cada universitat	MN	5-11-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.5	Gigabytes transferits de cada universitat	MN	5-11-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.6	Consultes per país/domini i universitat	MN	4-11-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.7	Les 25 tesis més consultades aquest any	MN	27-4-04	Sí	1-2-05	1-2-05	1-2-05
3.8	Les tesis més consultades el 2003	MN	5-11-04	Sí	1-3-04	1-3-04	
4	Intranet	MN	18-5-04	No	7-10-04	7-10-04	7-10-04
4.1	Pàgina principal del TDX_UB	MN	21-3-03	Sí	3-4-03		
4.1.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	3-4-03		
4.1.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	8-9-04		
4.1.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	3-4-04		
4.1.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	3-4-04		
4.1.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	3-4-04		
4.1.3	Navegar pel TDX_UB	MN	21-3-03	Sí	3-4-03		
4.2	Pàgina principal del TDX_UAB	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.2.3	Navegar pel TDX_UAB	MN	21-3-03	Sí	7-4-03		
4.3	Pàgina principal del TDX_UPC	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.3.3	Navegar pel TDX_UPC	MN	21-3-03	Sí	2-4-03		
4.4	Pàgina principal del TDX_UPF	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.4.3	Navegar pel TDX_UPF	MN	21-3-03	Sí	1-4-03		
4.5	Pàgina principal del TDX_UdG	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.5.3	Navegar pel TDX_UdG	MN	21-3-03	Sí	28-3-03		
4.6	Pàgina principal del TDX_UdL	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.6.3	Navegar pel TDX_UdL	MN	21-3-03	Sí	27-3-03		
4.7	Pàgina principal del TDX_URV	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		
4.7.3	Navegar pel TDX_URV	MN	21-3-03	Sí	31-3-03		

Apartat	Tema	Autor	Ent.	Gráf.	Català	Castellà	Anglès
4.8	Pàgina principal del TDX_UOC	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.8.3	Navegar pel TDX_UOC	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.9	Pàgina principal del TDX_UJI	MN	15-10-02	Si	29-10-02		
4.9.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	15-10-02	Si	15-10-02		
4.9.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	15-10-02	Si	15-10-02		
4.9.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	15-10-02	Si	15-10-02		
4.9.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	15-10-02	Si	17-12-02		
4.9.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	15-10-02	Si	15-10-02		
4.9.3	Navegar pel TDX_UJI	MN	15-10-02	Si	15-10-02		
4.10	Pàgina principal del TDX_UIB	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.10.3	Navegar pel TDX_UIB	MN	17-12-02	Si	17-12-02		
4.11	Pàgina principal del TDX_UV	MN	21-3-03	Si	2-2-04		
4.11.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.11.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.11.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.11.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.11.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.11.3	Navegar pel TDX_UV	MN	21-3-03	Si	4-4-03		
4.12	Pàgina principal del TDX_URL	MN	21-3-03	Si	20-10-04		
4.12.1	Introduir una nova tesi doctoral	MN	21-3-03	Si	6-10-04		
4.12.2	Revisar/Aprovar tesis doctorals introduïdes	MN	21-3-03	Si	6-10-04		
4.12.2.1	Tesis doctorals disponibles	MN	21-3-03	Si	6-10-04		
4.12.2.2	Gestió de les tesis disponibles	MN	21-3-03	Si	6-10-04		
4.12.2.3	Gestió de les tesis pendents	MN	21-3-03	Si	6-10-04		
4.12.3	Navegar pel TDX_URL	MN	21-3-03	Si	6-10-04		

Annex XI:

Les portades del web

S'ha renovat la portada del web en 10 ocasions, un cop al mes excepte a l'abril i l'octubre en què no es va renovar. La portada recull les novetats més destacades de cada mes, així com proporciona un accés directe a l'últim número publicat del *Teraflap*. Aquest annex recull les 10 portades publicades el 2004.

23-12

Més visibilitat al TDX



El servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) és proveïdor de dades de l'Open Archive Initiative (OAI). Això permet que les tesis doctorals electròniques estiguin disponibles per a ser difoses a través dels proveïdors de serveis de l'OAI. Actualment, el dipòsit de tesis del TDX està essent accedit per una dotzena de proveïdors de serveis.

23-10

Signatura digital



Signat un conveni perquè universitats i centres de recerca incorporin la signatura digital per augmentar la seguretat de les seves comunicacions telemàtiques. D'entrada es distribuiran un miler de certificats digitals entre els equips directius i gestors.

1-11

Oferta en l'ADSL

El CESCA i Auna Telecomunicacions amplien el termini de l'oferta especial per incentivar les connexions ADSL. Fins al 31 de desembre, quota d'alta gratuïta i quota mensual avantatjosa perquè investigadors i professors accedeixin a Internet a través de l'Anella des del seu domicili.

15-12

La UB, a Gigabit



La Universitat de Barcelona (UB) ha ampliat la seva connexió a l'Anella Científica de 100 Mbps a un gigabit. Degut a la proximitat de la UB amb el Centre, la connexió es produeix directament a través d'una línia pròpia del CESCA.

27-11

Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya



La quarta edició de la TSIUC ha tractat el rol estratègic de les TIC a la universitat i hi han assistit 113 persones. La TSIUC ha comptat amb les presentacions de gestors i investigadors.

11-12

Altecom, al CATNIX



El proveïdor d'Internet Altecom es connecta al CATNIX a una velocitat de 34 Mbps des de l'11 de desembre.

▀ [Veure més novetats](#)

Número 73



Recerca emergent: nanotecnologia i genòmica



[Números anteriors](#)

Ofertes

[Accés Remot: Tarifa plana](#)

[Accés Remot: ADSL](#)

Agenda

27-01 [Conferència Criptografia](#)

29-01 [Conferència Criptografia](#)

6-02 [GTSCD](#)



[Més activitats](#)

Últimes modificacions



[Anella Científica](#)



[Serveis Addicionals](#)



[Allotjament i Hostatge Servidors](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[Altecom](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

13-01

La UIC, a l'Anella



La Universitat Internacional de Catalunya (UIC) s'incorpora a l'Anella Científica a través d'una connexió a 10 Mbps. Aquesta universitat connecta el seu campus de Sant Cugat del Vallès.

22-01

Actualització EVA i HPC320



Del 2 al 6 de febrer es faran diverses actualitzacions al subsistema de discos EVA i a la màquina HPC320 (*guilleries*) per tal d'introduir-hi millores tant de maquinari com de programari. Per aquest motiu, la màquina restarà inaccessible durant aquests dies. Per tal de minimitzar el nombre de treballs afectats per aquests canvis s'aniran tancant progressivament les cues més llargues i es permetran més treballs curts.

22-01

Canvis al clúster LSF



A partir del 9 de febrer es duran a terme de forma esglaonada una sèrie de modificacions en la configuració del clúster LSF que poden afectar l'execució dels treballs. Aquests canvis es realitzen per permetre l'intercanvi de treballs entre totes les màquines del clúster, activar les quotes de disc i eliminar la comanda *g98* a *guilleries*.

26-01

L'ICIQ es connecta a l'Anella



L'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) es connecta a l'Anella Científica a una velocitat de 10 Mbps. Aquest Institut està situat al Campus de Sant Pere de Sescelades de la Universitat Rovira Virgili, a Tarragona.

4-02

Convocatòria d'hores de la CIRIT



S'ha obert la convocatòria d'hores addicionals a càrrec de la CIRIT per a tots els grups de recerca que tinguin un mínim de 7.500 HC concedides per la pròpia institució. Tots els interessats heu d'enviar el formulari d'*Ampliació d'HC concedides* abans del 13 de març.

22-01

Disponibilitat a l'HP N4000 i V2500



Els dies 16 i 17 de febrer s'instal·larà el programari HP Mirroredisk/UX als HP N4000 i V2500. Per aquest motiu, aquestes màquines estaran aturades de 9 a 13 hores. Aquest programari evita pèrdues de dades degudes a fallades de discos, mantenint fins a tres còpies de les dades en discos diferents.

■ [Veure més novetats](#)

Número 74



Servei de Certificació Digital a universitats i centres de recerca



[Números anteriors](#)

Ofertes

[Accés Remot: Tarifa plana](#)

[Accés Remot: ADSL](#)

Agenda

3-03	CTAC
9-03	Seguretat LAN sense fils
18-03	Workshop MAX-INF



[Més activitats](#)

Últimes modificacions



[Àrees de treball](#)



[GUSCF](#)



[Seguretat LAN sense fils](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[ICIQ](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

4-02

Convocatòria d'hores de la CIRIT



S'ha obert la convocatòria d'hores addicionals a càrrec de la CIRIT per a tots els grups de recerca que tinguin un mínim de 7.500 HC concedides per la pròpia institució. Tots els interessats heu d'enviar el formulari d'*Ampliació d'HC concedides* abans del 13 de març.

28-02

Ampliacions Anella



Diferents institucions han ampliat la seva velocitat d'accés a l'Anella: la UAB ha canviat dues línies a 100 Mbps cadascuna per una connexió al port gigabit a 500 Mbps, l'Institut de Ciències de la Terra Jaume Almera del CSIC ha ampliat fins a 100 Mbps; el Servei Català de la Salut, CatSalut, ha passat a 10 Mbps, i el Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya (CCGC), a 2 Mbps per ADSL. A més, el CCGC ha renovat el seu web.

9-02

L'Escola Universitària de Turisme de la UdG, a l'Anella

L'Escola Universitària de Turisme (EUT) de la Universitat de Girona s'ha connectat a l'Anella Científica. Aquesta connexió es porta a terme mitjançant un accés ADSL a 2 Mbps.

8-03

Convocatòria de ponències



S'obre el termini per a la presentació de propostes de ponències per a la Trobada de l'Anella Científica (TAC), que se celebrarà el 2 de juny a l'Institut Cartogràfic de Catalunya. El termini de presentació de ponències per a aquesta trobada finalitza el 3 de maig.

23-02

Actualitzacions

Per motius de seguretat s'ha actualitzat a les màquines V2500, N4000, HPC320, GS1280 i al servidor de fitxers les versions del programa de connexió segura *Secure Shell* (ssh). Al GS1280 ha estat actualitzat el sistema operatiu de *Tru64 5.1B Patch Kit 1* a *Patch Kit 3* i a la revisió 6.6-13 de *firmware*. També s'ha ampliat la grandària de les àrees de treball /home i /prod.

26-02

Nova edició del curs Opera Learning



Comença una nova edició del curs Opera Learning, un dels projectes i2CAT amb el Gran Teatre del Liceu que té com a objectiu acostar l'òpera als estudiants universitaris. Per a la retransmissió a les universitats s'usen la infraestructura de l'Anella i el servei de *multicast*.

■ [Veure més novetats](#)

Número 75



Memòria d'activitats de 2003



[Números anteriors](#)

Ofertes

[Accés Remot: Tarifa plana](#)

[Accés Remot: ADSL](#)

Agenda

21-04	Comissió Permanent
6-05	Consell de Govern
2-06	TAC'04



[Més activitats](#)

Últimes modificacions



[Què tenim?](#)



[Estadístiques comunicacions](#)



[Què tenim?](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[EUT UdG](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

23-03

Concessió d'hores CIRIT



La CIRIT ha resolt la concessió de les hores computacionals (HC) que subvenciona aquest organisme. S'han concedit 315.000 HC a 23 grups de recerca.

28-02

Ampliacions Anella



Diferents institucions han ampliat la seva velocitat d'accés a l'Anella: la UAB ha canviat dues línies a 100 Mbps cadascuna per una connexió al port gigabit a 500 Mbps, l'Institut de Ciències de la Terra Jaume Almera del CSIC ha ampliat fins a 100 Mbps; el Servei Català de la Salut, CatSalut, ha passat a 10 Mbps, i el Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya (CCGC), a 2 Mbps per ADSL. A més, el CCGC ha renovat el seu web.

9-02

L'Escola Universitària de Turisme de la UdG, a l'Anella

L'Escola Universitària de Turisme (EUT) de la Universitat de Girona s'ha connectat a l'Anella Científica. Aquesta connexió es porta a terme mitjançant un accés ADSL a 2 Mbps.

8-03

Inscripcions obertes



Obertes les inscripcions per assistir a la vuitena *Trobada de l'Anella Científica*. La TAC'04 tindrà lloc a l'Institut Cartogràfic de Catalunya el proper 2 de juny i tractarà aspectes relacionats amb la seguretat, la certificació digital i l'IPv6, entre altres. Inscripció gratuïta per als usuaris dels serveis del CESCA.

23-02

Actualitzacions

Per motius de seguretat s'ha actualitzat a les màquines V2500, N4000, HPC320, GS1280 i al servidor de fitxers les versions del programa de connexió segura *Secure Shell* (ssh). Al GS1280 ha estat actualitzat el sistema operatiu de *Tru64 5.1B Patch Kit 1 a Patch Kit 3* i a la revisió 6.6-13 de *firmware*. També s'ha ampliat la grandària de les àrees de treball /home i /prod.

26-02

Nova edició del curs Opera Learning



Comença una nova edició del curs Opera Learning, un dels projectes i2CAT amb el Gran Teatre del Liceu que té com a objectiu acostar l'òpera als estudiants universitaris. Per a la retransmissió a les universitats s'usen la infraestructura de l'Anella i el servei de *multicast*.

■ [Veure més novetats](#)

Número 75



Memòria d'activitats de 2003



[Números anteriors](#)

Agenda

19-05	CSIUC
2-06	TAC'04
16-07	Comissió Permanent



[Més activitats](#)

Últimes modificacions

- [Estadístiques de supercomputació](#)
- [TAC'04](#)
- [Allotjament i hosting webs](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[EUT UdG](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[[Qui som?](#)] [[Supercomputació](#)] [[Comunicacions](#)] [[Promoció](#)] [[On som?](#)] [[Novetats](#)] [[Agenda](#)] [[Enllaços](#)] [[Estadístiques web](#)] [[Mapa web](#)] [[Modificacions](#)] [[Nadales](#)]

30-04

La Fundació Puigvert, a l'Anella



La Fundació Puigvert es connecta a l'Anella Científica a 10 Mbps a través d'una connexió a la xarxa Giganet. A més, la delegació del CSIC a Catalunya ha augmentat a 10 Mbps la seva velocitat, connectant-se a través d'una seu de l'IEC.

8-05

El Fòrum, a les universitats



A través de l'Anella Científica, les universitats de Catalunya reben tots els diàlegs i alguns esdeveniments artístics del Fòrum de les Cultures 2004. La iniciativa Open Forum, promoguda per la Fundació i2CAT, permet la distribució del canal Diàlegs del Fòrum en format de vídeo d'alta qualitat i multilingüe.

18-05

Traspàs del TDX a l'HP rp5430



S'ha traspassat el servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) al servidor de webs i bases de dades HP rp5430 per tal de millorar-ne la disponibilitat i el rendiment, així com la velocitat del seu cercador de tesis.

2-06

Trobada de l'Anella Científica



La TAC'04 va tenir lloc a l'Institut Cartogràfic de Catalunya el passat 2 de juny i hi va haver presentacions relacionades amb la seguretat informàtica, la certificació digital i l'IPv6, entre altres.

6-05

Euro-IX arriba als 30 membres



L'associació europea de punts neutres Euro-IX, de la qual el CATNIX és membre fundador, compta ja amb 30 membres després de la incorporació del Berlin Commercial Internet Exchange (BCIX).

11-05

Disponible AutoDock 3.0.5



S'ha instal·lat a l'HPC320 (*guilleries*) el programari de docking AutoDock, versió 3.0.5, un conjunt de programes per predir la manera en què molècules petites s'uneixen a un receptor amb una estructura 3D coneguda.

■ [Veure més novetats](#)

Número 76



Una tesi sobre estimació de riscos, la més consultada al TDX



[Números anteriors](#)

Agenda

2-07	Comissió Tècnica CATNIX
16-07	Comissió Permanent
6-10	CTAC



[Més activitats](#)

Últimes modificacions



[Catalyst - SCP](#)



[Qui som?](#)



[Consell de Govern](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[Fundació Puigvert](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

29-06

Oferta de treball de tècnic de sistemes



El CESCA busca un llicenciat o enginyer tècnic en Química, preferentment graduat recent, per incorporar-se al Departament d'Assistència Tècnica. La seva tasca principal serà donar suport als usuaris i també col·laborarà en l'administració de projectes i la instal·lació i el manteniment de programari, entre altres. Els interessats han d'enviar el seu currículum abans del 16 de juliol.

9-06

L'Hospital General de Vic, directament a l'Anella



HOSPITAL GENERAL DE VIC

L'Hospital General de Vic (HGV) es connecta directament a l'Anella Científica a 16 Mbps. Anteriorment, disposava d'una velocitat d'11 Mbps connectant-se a través del punt d'accés a l'Anella de la Universitat de Vic.

14-06

Catalyst 4.9.1 disponible



Ha quedat instal·lada a la màquina SGI Octane la nova versió 4.9.1 del programa de cerca de farmacòfors Catalyst, un programa d'Accelrys, que té la capacitat de definir i cercar patrons en bases de dades d'estructures químiques tridimensionals de compostos d'interès biològic.

29-06

Oferta de treball de tècnic de promoció



El CESCA busca un llicenciat recent en Ciències de la Informació interessat en periodisme científic i tecnologies de la informació i la comunicació. Les seves tasques seran col·laborar en l'elaboració de notícies i la redacció de notes de premsa, entre altres. Els interessats han d'enviar el seu currículum abans del 16 de juliol.

21-06

Nou centre vinculat a l'IRTA, a l'Anella



L'Estació Experimental Fundació Mas Badia, centre consorciat amb l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA), s'ha connectat a l'Anella Científica a través d'una línia ADSL de 2 Mbps. Aquest centre està situat a La Tallada, Girona.

9-06

Kaos Redes IP, al CATNIX



El proveïdor d'Internet (ISP) Kaos Redes IP s'ha connectat al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX). Aquest ISP disposa d'una velocitat de commutació i de línia de 100 Mbps. Actualment, a més de l'Anella Científica, intercanvien tràfic 18 operadors i ISP.

■ [Veure més novetats](#)

Número 76



Una tesi sobre estimació de riscos, la més consultada al TDX



[Números anteriors](#)

Agenda

6-10	CTAC
15-10	Comissió Permanent
24-11	GUCAIP



[Més activitats](#)

Últimes modificacions



[GTSEG](#)



[CSIUC](#)



[Els Departaments](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[Kaos Redes IP](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[[Qui som?](#)] [[Supercomputació](#)] [[Comunicacions](#)] [[Promoció](#)] [[On som?](#)] [[Novetats](#)] [[Agenda](#)] [[Enllaços](#)] [[Estadístiques web](#)] [[Mapa web](#)] [[Modificacions](#)] [[Nadales](#)]

14-06

La URL s'integra al Consorci



El president del CESCA, Rafael Español i Navarro, i la rectora de la Universitat Ramon Llull (URL), Esther Giménez-Salinas i Colomer, han signat el conveni perquè aquesta universitat s'incorpori al Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya. El passat 6 de maig el Consell de Govern del CESCA havia aprovat la sol·licitud d'aquesta universitat per integrar-se al Consorci.

9-06

L'Hospital General de Vic, directament a l'Anella



HOSPITAL GENERAL DE VIC

L'Hospital General de Vic (HGV) es connecta directament a l'Anella Científica a 16 Mbps. Anteriorment, disposava d'una velocitat d'11 Mbps connectant-se a través del punt d'accés a l'Anella de la Universitat de Vic.

14-06

Catalyst 4.9.1 disponible



Ha quedat instal·lada a la màquina SGI Octane la nova versió 4.9.1 del programa de cerca de farmacòfors Catalyst, un programa d'Accelrys, que té la capacitat de definir i cercar patrons en bases de dades d'estructures químiques tridimensionals de compostos d'interès biològic.

29-07

Convocatòria de ponències per a la TSIUC'04



"La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos" és el títol de la TSIUC'04, que es durà a terme el 24 de novembre a l'Internet Interdisciplinary Institute (IN3) de la Universitat Oberta de Catalunya. Feu-nos arribar les vostres propostes de ponència a promocio@cesca.es.

21-06

Nou centre vinculat a l'IRTA, a l'Anella



L'Estació Experimental Fundació Mas Badia, centre consorciat amb l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA), s'ha connectat a l'Anella Científica a través d'una línia ADSL de 2 Mbps. Aquest centre està situat a La Tallada, Girona.

9-06

Kaos Redes IP, al CATNIX



El proveïdor d'Internet (ISP) Kaos Redes IP s'ha connectat al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX). Aquest ISP disposa d'una velocitat de commutació i de línia de 100 Mbps. Actualment, a més de l'Anella Científica, intercanvien tràfic 18 operadors i ISP.

■ [Veure més novetats](#)

Número 77



Seguretat i certificació digital a la TAC'04



[Números anteriors](#)

Agenda

6-10	CTAC
15-10	Comissió Permanent
24-11	TSIUC'04



[Més activitats](#)

Últimes modificacions

- [GTSCD](#)
- [Estadístiques supercomputació](#)
- [Anella Científica](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[URL](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

1-09

Convocatòria de projectes de supercomputació

Els grups de recerca rebran properament dels seus vicerektorats o del coordinador institucional del CSIC a Catalunya la convocatòria per als projectes acadèmics per a l'any vinent. El total d'hores computacionals disponibles és de 474.900. Els projectes no renovats abans del 15 de desembre es tancaran el 31 de desembre.

9-09

Augments de cabal a l'Anella



L'Escola Superior de Música de Catalunya (ESMUC) i la Unitat Docent de la Facultat de Medicina de la UAB a l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol es connecten a l'Anella Científica a 10 Mbps. Anteriorment, les dues es connectaven a 2 Mbps, la primera mitjançant una connexió ADSL i la segona a través d'una línia Frame Relay.

14-06

La URL s'integra al Consorci



La Universitat Ramon Llull (URL) és la primera universitat privada a incorporar-se al Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya. La URL és usuària des de fa anys dels serveis de comunicacions de l'Anella Científica i d'altres serveis del CESCA. Ara, a més a més, podrà implicar-se en la presa de decisions que afectin el futur i els serveis del Consorci, fins ara liderat exclusivament per les universitats públiques catalanes.

29-07

Convocatòria de ponències per a la TSIUC'04



"La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos" és el títol de la TSIUC'04, que es durà a terme el 24 de novembre a l'Internet Interdisciplinary Institute (IN3) de la Universitat Oberta de Catalunya. Feu-nos arribar les vostres propostes de ponència fins el 15 d'octubre a promocio@cesca.es.

29-07

La UdL passa de l'Ethernet a la xarxa Giganet



La Universitat de Lleida (UdL) es connecta a la xarxa Giganet d'Al-Pi Telecomunicacions. Anteriorment, la UdL es connectava mitjançant un enllaç Ethernet. Així, actualment disposa de més fiabilitat gràcies als camins diferents pels quals transcorre la fibra.

14-09

AMBER 8.0 disponible



Ha quedat instal·lat a l'HPC320 (*guillerries*) i el GS1280 (*montrouig*) la nova versió 8.0 del programa de modelat molecular AMBER. En ambdues màquines es disposa de la versió seqüencial i de la versió paral·lela MPI. Per a més informació sobre l'accessibilitat i l'ús del programa consulteu la secció [Programari de supercomputació](#).

■ [Veure més novetats](#)

Número 77



Seguretat i certificació digital a la TAC'04



[Números anteriors](#)

Agenda

1-10	GTAAS
15-10	Comissió Permanent
24-11	TSIUC'04



[Més activitats](#)

Últimes modificacions

- [Eines de programació en C](#)
- [Allotjament i Hostatge de Servidors](#)
- [Anella Científica](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNEX](#)

[TDX](#)

[ESMUC](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

24-11

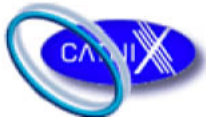
Cinquena edició de la TSIUC



"La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos" és el títol de la TSIUC'04, que es va dur a terme el 24 de novembre a l'Internet Interdisciplinary Institute (IN3) de la Universitat Oberta de Catalunya.

18-10

Milliores a l'Anella i el CATNIX



Tant l'Anella com el CATNIX disposen de més funcionalitats, com ara increment de l'escalabilitat per ampliar les connexions cap a RedIRIS i el troncal de l'Anella, més capacitat per a la taula d'encaminament, IPv6 natiu i millores en la qualitat de servei, gràcies a l'actualització del commutador de l'Anella.

1-09

Convocatòria de projectes de supercomputació

Els grups de recerca rebran properament dels seus vicerektorats o del coordinador institucional del CSIC a Catalunya la convocatòria per als projectes acadèmics per a l'any vinent. El total d'hores computacionals disponibles és de 474.900. Els projectes no renovats abans del 15 de desembre es tancaran el 31 de desembre.

1-10

Anunci de licitació de supercomputació

S'ha obert un concurs públic per a la renovació de l'equipament de càlcul d'altas prestacions. El termini per a la presentació de proposicions finalitza el proper 22 de novembre. El pressupost base de licitació és de 612.000 €, IVA inclòs.

8-10

Setmana de la Ciència



En el marc de la Setmana de la Ciència, i com ja és habitual, el CESCA va organitzar la **Jornada de Portes Obertes** del 8 al 12 de novembre. Es van fer visites guiades per mostrar els serveis, els projectes i les instal·lacions. A més a més, el dimecres dia 10, el Dr. Eduard Salvador, catedràtic d'Astrofísica a la Universitat de Barcelona i president de la Societat Espanyola d'Astronomia, va oferir una conferència sota el títol "Buscant entendre com s'han format les galàxies".

14-10

L'Anella porta l'òpera a les universitats



El Gran Teatre del Liceu organitza la tercera edició del curs Òpera Oberta, una assignatura de lliure elecció per als universitaris. A Catalunya, la retransmissió es fa a través de la infraestructura de l'Anella Científica.

■ [Veure més novetats](#)

Número 78



Mig segle de CERN, el major laboratori de física de partícules



[Números anteriors](#)

Agenda

- 26-11 Comissió Tècnica CATNIX
- 13-12 Comissió Executiva CATNIX
- 21-12 GUCAP



[Més activitats](#)

Últimes modificacions

- [CSIUC](#)
- [L'Anella Científica](#)
- [Procediments d'adhesió](#)



[Modificacions anteriors](#)

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[Òpera Oberta](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[\[Qui som?\]](#) [\[Supercomputació\]](#) [\[Comunicacions\]](#) [\[Promoció\]](#) [\[On som?\]](#) [\[Novetats\]](#)
[\[Agenda\]](#) [\[Enllaços\]](#) [\[Estadístiques web\]](#) [\[Mapa web\]](#) [\[Modificacions\]](#) [\[Nadales\]](#)

17-12

Anunci d'adjudicació de supercomputació

Ha estat adjudicat a Silicon Graphics (SGI) el concurs per a la renovació de l'equipament de supercomputació. El Centre comptarà amb un Altix 3700 Bx2 amb 80 processadors Itanium2 d'1,6 GHz, 240 GB de memòria principal i 5,13 TB de disc.

24-11

Cinquena edició de la TSIUC



"La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos" és el títol de la TSIUC'04, que es va dur a terme el 24 de novembre a l'Internet Interdisciplinary Institute (IN3) de la Universitat Oberta de Catalunya.

26-11

Museu del Vi i CTEFC, a l'Anella



El passat 27 d'octubre la Fundació Privada *Museu de Vilafranca-Museu del Vi* va quedar connectada a l'Anella Científica a través d'una línia ADSL de 2 Mbps, mentre que el *Centre Tecnològic Forestal de Catalunya* ho va fer el 18 de novembre. Posteriorment el cabal d'ambdós centres ha estat ampliat fins a 4 Mbps. A més l'IRTA va connectar el passat 26 de novembre el seu *Centre d'Aqüicultura*.

El CESCA i el CBUC us desitgen...



16-11

Un milió de consultes



El servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) ha rebut més d'un milió de consultes des de l'inici del 2004. En el darrer any, aquest servidor ha incrementat de forma considerable el nombre de consultes. Al novembre n'ha rebut més de 165.000.

29-11

Hostatjat el web de la Biblioteca de Montserrat



S'ha hostatjat el web de la Biblioteca de Montserrat, www.bibliotecademontserrat.net, que permet consultar el catàleg general, el de manuscrits i el d'incunables, així com exposicions i fons gràfic.

1-11

10 anys de Teraflop

El novembre de 1994 apareixia el primer número del noticiari del CESCA, *Teraflop*. Deu anys més tard, el *Teraflop* continua informant de les novetats en supercomputació i en comunicacions avançades.

[Veure més novetats](#)

Número 79



Una dècada de *Teraflop*



[Números anteriors](#)

Agenda

19-01	GTSCD
31-01	Programació d'arquitectures...
18-02	Comissió Permanent



[Més activitats](#)

Últimes modificacions

	Documentació
	Els departaments
	Nadales
	Modificacions anteriors

Enllaços d'interès

[CATNIX](#)

[TDX](#)

[Biblioteca de Montserrat](#)



[Més enllaços](#)

Centre de Supercomputació de Catalunya

[[Qui som?](#)] [[Supercomputació](#)] [[Comunicacions](#)] [[Promoció](#)] [[On som?](#)][[Novetats](#)] [[Agenda](#)] [[Enllaços](#)] [[Estadístiques web](#)] [[Mapa web](#)] [[Modificacions](#)] [[Nadales](#)]

Annex XII:

Les novetats del web

S'han publicat un total de 89 novetats al web del CESCA:

Gener

- 13 La Universitat Internacional de Catalunya es connecta a l'Anella a 10 Mbps.
- 22 4 TB més de disc a l'EVA i 8 GB més de memòria a l'HPC320.
Canvis en la configuració del clúster LSF.
Més disponibilitat als HP N4000 i V2500 amb *Mirroredisk/UX*.
Millora la disponibilitat i el rendiment de l'HP rp5430.
- 26 L'Institut Català d'Investigació Química, a l'Anella a 10 Mbps.
- 27 El Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya amplia fins a 2 Mbps.
- 28 El CatSalut augmenta a 10 Mbps la seva connexió a l'Anella.
- 30 Canvis en el Consell de Govern del CESCA.

Febrer

- 4 Convocatòria d'hores de la CIRIT.
- 9 L'Escola Universitària de Turisme de la UdG es connecta a l'Anella.
- 12 La UAB amplia la seva connexió a 500 Mbps.
- 16 ICTnet deixa d'estar connectat al CATNIX.
Comença una nova edició del curs Opera Learning.
Ampliació */cescascratch* a 369 GB i 30 dies.
Nexica augmenta a 6 Mbps el seu cabal al CATNIX.
- 17 Actualització *Secure Shell* (ssh).
El CSIC augmenta una de les seves connexions fins a 100 Mbps.
- 19 El Consell Consultiu estrena web.
- 23 GS1280 Tru64 5.1B PK3 i ampliació àrees de treball.
- 26 Tru64 5.1B PK3 al servidor de fitxers.

Març

- 3 Oberta la convocatòria de ponències per a la TAC'04.
- 8 Nou programari a l'HP rp5430.
- 9 Connexió d'una nova seu de l'IEC a l'Anella.
- 10 DL_POLY 2.14 disponible.
1.500 tesis doctorals al TDX.
- 12 T-Systems Eltec, connectat al CATNIX.
- 15 Connexió de la Fundació Universitat de Girona: Innovació i Formació, de la UdG.
- 23 Concessió d'hores de la CIRIT.
- 24 Escola de Turisme Sant Ignasi, nova connexió de la URL.
- 31 GROMACS 3.2.1 disponible.
Avaluació base de dades Jubilant Kinase.

Abril

- 29 La delegació del CSIC, a 10 Mbps.

30 La Fundació Puigvert s'incorpora a l'Anella.

Maig

- 6 Euro-IX compta amb 30 membres.
- 8 L'Anella porta el Fòrum a les universitats.
- 10 L'IGC/INET, connectat a través de l'Anella.
- 11 AutoDock 3.0.5 disponible.
- 18 Traspàs del TDX a l'HP rp5430.

Juny

- 2 Seguretat informàtica i certificació digital a la Trobada de l'Anella Científica.
- 7 L'Hospital General de Vic es connecta directament a l'Anella.
- 9 Kaos Redes IP es connecta al CATNIX.
- 10 Datagrama deixa d'estar connectat al CATNIX.
- 14 Catalyst 4.9.1 disponible.
La URL s'incorpora al Consorci.
Canvis en els òrgans de govern.
- 21 Es connecta a l'Anella un nou centre vinculat a l'IRTA.
- 29 Oferta de treball de tècnic de sistemes.
Oferta de treball de tècnic de promoció.

Juliol

- 28 La Unitat Docent de l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol amplia el seu cabal.
- 29 Convocatòria de ponències per a la TSIUC'04.
La UdL passa de l'Ethernet a la xarxa Gigaset.

Setembre

- 1 Convocatòria de projectes de supercomputació per al 2005.
- 14 L'Escola Superior de Música de Catalunya, a 10 Mbps.
Amber 8.0 disponible.
- 22 Nova versió d'ANSI C i aC++.
Nova versió d'f90 a les HP.

Octubre

- 1 Anunci de licitació per a la renovació de l'equipament de supercomputació.
- 5 El Barcelona Centre Universitari estrena web.
- 8 Jornada de Portes Obertes.
L'Idescat amplia a 10 Mbps.
- 13 Adam augmenta a 4 Mbps el seu cabal al CATNIX.
- 14 Nou curs Òpera Oberta a través de l'Anella.
- 15 L'Escola Universitària Salesiana de Sarrià, a 10 Mbps.
- 18 Millores a l'Anella i el CATNIX.
- 20 Regularització d'hores del CIRIT.
- 25 Gaussian 03 Rev. C.02 disponible.
ADF2004 disponible.
2.000 tesis doctorals.
- 27 El Museu del Vi s'incorpora a l'Anella Científica.

Novembre

- 1 10 anys de *Teraflop*.
- 8 Llibreria FFTW instal·lada.

- 8 Primera tesi de la Universitat Ramon Llull al TDX.
- 15 Rang d'adreces IP propi.
- 16 Rebudes un milió de consultes en el TDX.
- 17 Anunci per l'elaboració d'una Política de Seguretat.
La Unitat Docent i l'Hospital Vall d'Hebron comparteixen l'accés a l'Anella.
Experiència Grid en el projecte GAIA.
- 18 El Centre Tecnològic Forestal s'incorpora a l'Anella.
Telefónica amplia la seva connexió al CATNIX.
- 19 La Universitat Abat Oliba CEU signa la seva adhesió a l'Anella.
- 24 Duplicacions de velocitat de les línies ADSL.
La TSIUC'04 debat els beneficis de l'ús de la certificació digital.
- 26 El Centre d'Aqüicultura de l'IRTA, connectat a l'Anella.
- 29 Hostatjat el web de la Biblioteca de Montserrat.

Desembre

- 13 Baixa d'Intelideas al CATNIX.
- 17 Anunci d'adjudicació per a la renovació de l'equipament de supercomputació.
- 23 Migració d'alguns serveis de comunicacions.
- 27 El Barcelona Supercomputing Center, a l'Anella.

El text íntegre d'aquestes novetats està disponible al web.

Annex XIII:

La formació

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

Durant el 2004 s'han realitzat 14 conferències, sis a l'hivern, quatre a la primavera i quatre a la tardor:

1. M. Huguet, The CESCA at the Service of the University and the Research.
2. H. Scolnik, Criptografia aplicada a les transaccions electròniques.
3. H. Scolnik, Criptografia aplicada a la privadesa i la confidencialitat.
4. J. Custers i C. Mari, Seguretat en xarxes sense fils (Wireless LAN).
5. C. Fragoso, II Fòrum de Seguretat RedIRIS.
6. M. Huguet, More GS1280 Experiences at CESCA.
7. M. Huguet, L'Anella Científica.
8. M. Huguet, Les estructures de suport a la investigació: el cas del CESCA.
9. B. Cherel, Tripos software presentation.
10. M. Huguet, Gestió d'un centre de serveis telemàtics: el cas del CESCA.
11. C. Parals, L'Anella Científica: una infraestructura clau per a la Universitat i la Recerca.
12. M. Huguet, La e-Ciencia en España.
13. E. Salvador, Buscant entendre com s'han format les galàxies.
14. M. Huguet, Infraestructuras Avanzadas de Soporte a la Investigación en España.

A l'Aula de Noves Tecnologies s'han impartit 3 cursos:

1. Introducció a l'ús de Perl en la resolució de problemes bioinformàtics.
2. Servei de Certificació Digital: Operativa de les Entitats de Registre Virtuals.
3. Curs d'Eines de Desenvolupament de KeyOne®.

Per acabar, s'han organitzat 2 jornades i 1 seminari:

1. Workshop MAX-INF sobre *phasing* i refinament.
2. Trobada de l'Anella Científica.
3. La certificació digital a la universitat: agilització de processos i reducció de costos.

El text íntegre d'aquestes activitats està disponible al web.