

TERAFLOP

CESCA 1991
2001
anys

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 58 • Abril 2001



Tercer Pla de Recerca

Entrevista a Antoni Oliva,
director de la CIRIT

Memòria d'activitats
del CBUC

Tiscali-Nacamar
es connecta al CATNIX

Investigadors de
la UB treballen en
nous tractaments
de l'Alzheimer

Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya

El Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) ha complert per primera vegada el cicle de quatre anys marcat en els seus Estatuts. Per aquest motiu, l'últim Consell de Govern va analitzar no només els resultats de l'any 2000 sinó també d'aquest quadrienni. Un període en el qual, a més del Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya pel qual es va iniciar el Consorci, s'han creat d'altres serveis per a la comunitat universitària: el programa de préstec interbibliotecari, la Biblioteca Digital de Catalunya i els diferents projectes iniciats al voltant d'aquesta.

Com explica el president del CBUC, Joan Majó, "si una cosa queda clara dels desenvolupaments internacionals al voltant de les biblioteques digitals és que aquestes ja no seran el resultat d'actuacions individuals d'institucions, sinó la tasca col·lectiva de moltes a l'entorn d'un objectiu comú, proporcionar serveis bibliotecaris de qualitat".

El Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya

El Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya (CCUC) ha continuat creixent a causa sobretot de les incorporacions de catalogació corrent de les biblioteques que hi participen i, en menor mesura, a la incorporació de noves institucions. El 2000 s'han incorporat 90.665 registres bibliogràfics nous corresponents a 354.983 volums. El total de documents diferents representats al CCUC eren 1.708.241 a final d'any, quantitat que correspon a 3.697.530 documents físics accessibles a les diferents biblioteques integrades al Catàleg.

La catalogació per còpia quant a títols ha estat del 54,24% i ha augmentat un 1,64% respecte el 1999, mentre que la catalogació per còpia relativa a volums ha passat a ser del 66,59%, respecte al 71,11% de l'any anterior. La baixada del percentatge de la catalogació per còpia pel que fa a volums es deu al fet que les tasques de recon-

versió de les biblioteques estan també disminuint, i les que es realitzen es reforeixen a col·leccions molt especials que no es troben catalogades en el CCUC. Així, els increments del CCUC reflecteixen cada vegada més els increments de les col·leccions.

S'han incorporat al CCUC les biblioteques de la Fundació Universitària del Bages, Rosa Sensat, la Biblioteca Pública Arús i la del Centre Unesco de Catalunya. D'aquestes, només Rosa Sensat aporta fons procedents del seu catàleg automatitzat. La càrrega de registres s'ha fet al mes de desembre i ha suposat l'increment de 13.549 registres bibliogràfics al Catàleg. El CCUC ha demostrat ser una bona eina per a l'automatització de catàlegs manuals, en aquest sentit s'han fet informes per a la Biblioteca Pública Arús, la Biblioteca Episcopal de Vic i la Biblioteca del Centre de Lectura de Reus.

Ahora, les institucions que integren el CCUC han incorporat als seus catàlegs fons procedents d'altres biblioteques, de manera que aquests



La Comissió Executiva del CBUC es va reunir el passat 7 de març.

fons han passat a ser consultables també des del CCUC. Aquests són el fons Sabater Pi i fons Grewe que s'han integrat al catàleg de la Universitat de Barcelona i el fons de la Junta de Residus que s'ha integrat al catàleg de la biblioteca del Departament de Medi Ambient de la Generalitat de Catalunya.

Préstec interbibliotecari i accés a les col·leccions

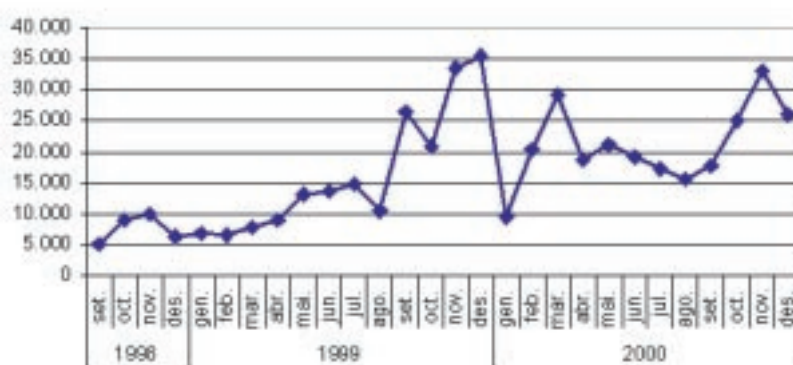
El programa de préstec interbibliotecari és el segon més antic dels que manté el CBUC. El nombre total de moviments del 2000 han estat 19.983 (amb un increment del 49,12% respecte al 1999) i els subministraments positius han estat el 86,07% del total (molt a prop del 87,05 % del 1999), cosa que indica una clara voluntat de servei cooperatiu per part de les biblioteques.

El 1999, el percentatge de peticions de documents resoltes en quatre dies o menys per part de les institucions que demanen el document i el de peticions que se subministren en nou dies o menys havia empitjorat respecte a l'any anterior, però el 2000 el servei ha recuperat els nivells de qualitat que havia tingut el 1998. Les xifres indiquen que en un 71,81% dels casos, les peticions de documents són resoltes en quatre dies o menys per part de les institucions que demanen el document, i el 92,27% de peticions se subministren en nou dies o menys (el 1999 un 66,47% de documents van ser subministrats en quatre dies o menys i un 85,74% en nou dies o menys).

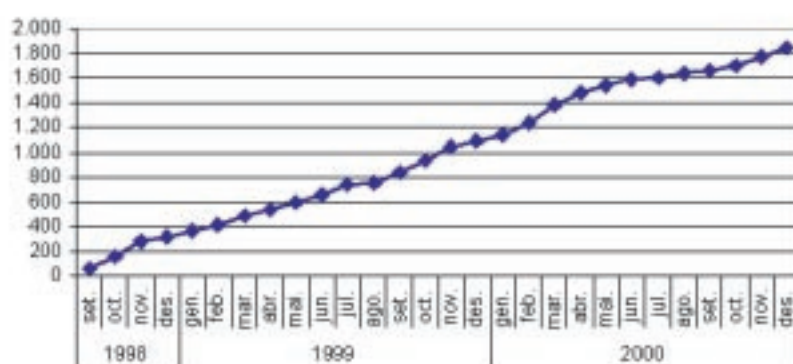
Les comandes són fetes per correu electrònic en el 98,62% dels casos i els documents subministrats es distribueixen de la següent forma: en un 39,19% són documents originals (majoritàriament llibres) i en el 60,81% restant es tracta de fotocòpies. Es pot comprovar que el nombre de llibres que es deixen per aquest sistema és considerable des que el 1998 es va acordar una important reducció de les tarifes interconsorciades.

Els acords per facilitar l'accés d'usuaris a les biblioteques consorciades (del 1998) i per permetre el préstec *in situ* a professors, investigadors i personal d'administració i serveis de les institucions del CBUC (del 1999)

Base de dades de sumaris: Consultes



Base de dades de sumaris: Usuaris subscrits



han funcionat sense problemes i es mantenen vigents després dels períodes de prova.

La Biblioteca Digital de Catalunya

La Biblioteca Digital de Catalunya (BDC) va sorgir com a projecte el novembre de 1997 en una reunió del CBUC amb els vicerectors de Recerca de les universitats públiques de Catalunya, però no va iniciar els seus serveis fins al 1999. La finalitat perseguida amb la BDC és proporcionar un conjunt nuclear d'informació electrònica interdisciplinària per a la totalitat de la comunitat universitària i investigadora de Catalunya independentment d'on aquestes persones exerceixin aquesta activitat.

L'any 2000 s'han dedicat importants esforços a consolidar i a ampliar

el finançament de la BDC. Cal destacar l'acord a què les institucions del CBUC van arribar al febrer d'una fórmula de participació financera en el cost de les subscripcions.

La participació del CBUC en les reunions europees de l'ICOLC (*International Coalition of Library Consortia*) ha permès constatar que iniciatives com les de la BDC són les que estan emprenent els països més avançats en serveis bibliotecaris. A final d'any es va acordar que institucions no-membres del CBUC poguessin incorporar-se als serveis de la BDC si feien una aportació econòmica equivalent a la resta d'institucions, i la Universitat Jaume I i la Universitat de Vic van acordar la seva participació en la BDC.

Malgrat que la subvenció no ha augmentat, el 2000 –gràcies a les aportacions de les institucions del CBUC– la BDC ha incorporat els següents serveis d'informació electrònica:

- Business Source Elite (base de dades d'economia que incorpora gairebé un miler de revistes a text complet).
- Inside (base de dades generalista, referències de les 20.000 revistes i 16.000 congressos més demanats en préstec interbibliotecari a la British Library).
- Emerald (141 revistes electròniques multidisciplinars de l'editorial MCB).
- The Serials Directory (informació bibliogràfica sobre més de 178.000 títols de revista).
- Zentralblatt Math (accés a la rèplica que hi ha al CIESA d'aquesta base de dades de matemàtiques que ressenya més de 2.000 revistes i congressos des del 1931).
- Banc de dades de biodiversitat, cartografia d'hàbitats d'interès comunitari a Catalunya, legislació ambiental, Protinat (bases de dades ambientals patrocinades pel Departament de Medi Am-

bient de la Generalitat de Catalunya).

- BIGPI (referències de més de 8.000 documents sobre geologia de la Península Ibèrica. Aquesta base de dades ha estat elaborada per la UB i el CSIC).

Amb aquestes incorporacions, el contingut de la BDC l'any 2000 ha estat:

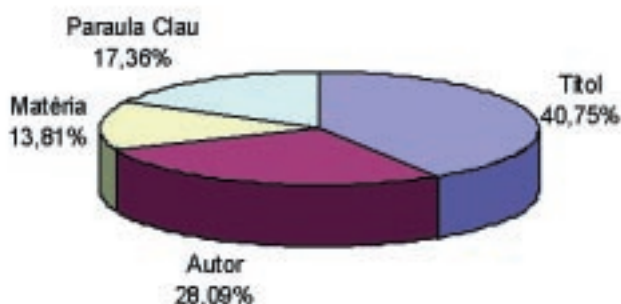
- Les bases de dades: BDA Aranzadi (dret), BSE i Econlit (economia), Eric (educació), Inside (multidisciplinar), Mathscinet (matemàtiques), Medline (medicina) i The Serials Directory (informació bibliogràfica sobre revistes).
- Les revistes electròniques de les editorials Academic Press i MCB.
- La rèplica de la base de dades Zentralblatt Math (matemàtiques).
- Les bases de dades catalanes: Construdoc (construcció), Cuidatge (infermeria), Enovit (enologia), Història Local de Catalunya, Traces (llengua i literatura), BIGPI (geologia de la Península

la Ibèrica), banc de dades de biodiversitat, cartografia d'hàbitats d'interès comunitari a Catalunya, legislació ambiental i Protinat (medi ambient).

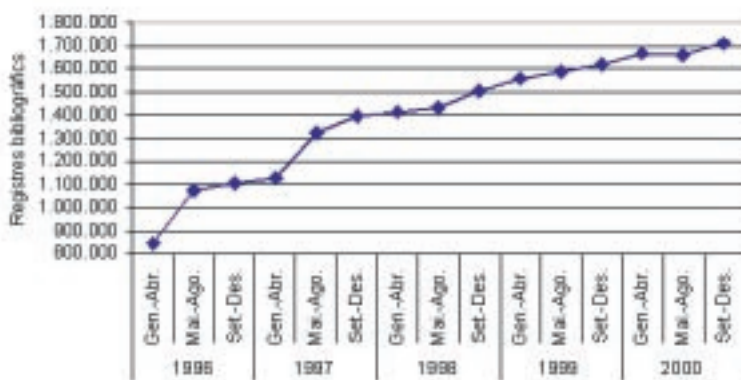
Els dos anys encara no complets de funcionament de la BDC fan que sigui prematura qualsevol avaluació precisa del seu ús. Les dades estadístiques en entorns de consulta a través del web no estan encara consolidades, però la progressió de consultes entre 1999 i el 2000 mostra creixements espectaculars en els següents casos:

- Aranzadi, amb un increment de consultes del 479%.
- Econlit, amb un increment de consultes del 136%.
- Eric, amb un increment de consultes del 36%.
- Mathscinet, amb un increment de consultes del 38%.

Tipus de consulta al CCUC



CCUC: Creixement de la base de dades



Base de dades de sumaris electrònics, TDC@t i indexació de recursos electrònics

Les activitats relacionades amb la Biblioteca Digital han anat agafant més i més protagonisme dins del CBUC. Tres programes inclosos en la BDC han pres cos propi. Són la base de dades de sumaris electrònics, el TDC@t i la indexació de recursos electrònics.

La base de dades de sumaris electrònics de revistes subscrietes es va migrar el 2000 a un ordinador Unix. El servei ha funcionat tot l'any en el nou entorn cosa que ha permès gestionar amb més facilitat els sumaris i, especialment, ampliar els de la base de dades amb nous sumaris introduïts per les institucions consorciades. A final d'any el nombre de revistes incloses era 6.989, les consultes rebudes han estat 252.004 (un increment del 27,37% respecte l'any anterior) i 1.838 els usuaris actius (un increment del 40,69% respecte el 1999).

Durant el 2000 també s'ha posat en marxa el servidor TDC@t que conté en format digital tesis doctorals llegides a les universitats de Catalunya. Aquest projecte, que permet la consulta remota a través de la xarxa Internet del text complet de les tesis, s'inscriu dins el marc global del conveni "La universitat digital a Catalunya 1999-2003" signat



JORDI PARETO

La plantilla del CBUC ha treballat l'any 2000 per millorar els serveis que proporciona el Consorci als seus usuaris.

pel DURSI, les universitats públiques de Catalunya, el CESCA i el CBUC a final del 1999. El CESCA ha posat a punt el programari, les universitats han iniciat els treballs interns que permetran harmonitzar les seves tasques administratives i acadèmiques amb els requisits propis del projecte, i el CBUC ha coordinat els aspectes legals i tècnics del projecte.

La indexació de recursos electrònics és un tema present al pla de treball del CBUC des del 1999. L'objectiu és estudiar els avantatges i les possibilitats d'indexar de forma cooperativa recursos electrònics a Internet d'interès per a les biblioteques del Consorci. Dins aquest programa s'ha encarregat un estudi sobre metadades i s'ha creat un grup de treball amb la missió d'estudiar criteris comuns de selecció, manteniment i "catalogació" de recursos electrònics.

Suport informàtic i gestió

El suport informàtic del CBUC s'ha centrat principalment a mantenir consultable i al dia el CCUC. Durant l'any s'han continuat fent les trameses corresponents dels registres bibliogràfics per al CD-ROM de Rebiun. En el manteniment hi ha col·laborat de forma activa i eficaç el CESCA. A més, l'activitat informàtica s'ha aplicat al manteniment i posada en funcionament dels serveis d'informació electrònica de la BDC i, especialment, en

El CCUC ha augmentat a 2.687.883 els seus índexs de consultes, 674.173 més que l'any anterior.

la instal·lació en local d'algunes bases de dades.

El 2000 ha entrat en funcionament l'aplicació de la base de dades de sumaris electrònics sobre una plataforma Unix. Aquest canvi ha permès una autonomia dels serveis i una flexibilitat en la seva gestió més gran i, sobretot, la incorporació de sumaris procedents de l'escaneig fet per les biblioteques del Consorci. Un altre camp de dedicació ha estat l'adaptació i posada en funcionament dels programes que gestionen l'aplicació del servidor de tesis doctorals en format electrònic TDC@t.

També s'han mantingut reunions amb els responsables dels serveis informàtics de les institucions consorciades per planificar el futur de l'aplicació del CCUC i dels catàlegs locals. Això ha suposat que al llarg del 2000 es fessin algunes migracions de servidors de catàlegs de màquines HP 3000 a màquines Unix. Finalment, s'ha traduït el web del CBUC al castellà i a l'anglès i s'ha organitzat una intranet per subministrar informació interna als membres del Consorci. ■

Noves tecnologies... en català

Privacitat o privadesa?

Les noves tecnologies permeten un intercanvi fàcil, ràpid i constant d'informació. Alhora, però, fan que cada dia ens sentim menys segurs respecte al fet que les nostres dades personals poden ser difoses arreu, en qualsevol moment, sense el nostre consentiment.

La preocupació creixent per preservar del domini públic les dades en general ha implicat la difusió ràpida del neologisme (mot nou) **privacitat**, que designa el caràcter no públic de les informacions. És una forma que es considera poc adequada en català des del punt de vista lingüístic perquè deriva anòmalament de l'adjectiu **privat** i és, en definitiva, un calc directe del terme anglès **privacy**. En castellà, en diuen **intimidad** i **privacidad**, en francès **confidentialité** i en italià **privatessa**.

En català, el nom creat regularment d'acord amb els recursos de creació de mots en la llengua és **privadesa**.

Cal tenir en compte que, si bé en tots els contextos **privadesa** pot substituir **privacitat**, en molts casos és més natural utilitzar els mots **intimitat** (per exemple, en el cas de "dret a la intimitat") o **confidencialitat** (per exemple, en el cas de "deure de confidencialitat").

Centre de Terminologia **TERMCAT**
www.termcat.es



Antoni Oliva, director de la CIRIT

El passat 6 de febrer el Consell Executiu de la Generalitat de Catalunya va aprovar el document del tercer Pla de Recerca de Catalunya, un pla amb dos eixos d'actuació principals: els recursos humans i els centres de recerca. Com explica el director de la Comissió Interdepartamental de Recerca i Innovació Tecnològica (CIRIT), Antoni

Oliva, a Catalunya hi ha "pocs investigadors i s'inverteix encara poc en recerca", per aquest motiu "el principal objectiu del tercer Pla de Recerca és expandir el sistema de ciència i tecnologia de Catalunya, i tenir més investigadors i centres de recerca bons que puguin incorporar-se a les futures xarxes europees".

La Generalitat de Catalunya no té traspassats els recursos de recerca des de l'Administració central. Com es pot compensar aquest inconvenient a l'hora de planificar una política de recerca?

Tot i no tenir traspassats els recursos, la Generalitat de Catalunya està fent des de fa molts anys un gran esforç per impulsar la recerca que es fa a Catalunya i prova d'aquest esforç són els plans de recerca que es van començar a fer l'any 1993 i dels quals ara comença el tercer. Ja que no tenim tots els diners que podríem tenir si disposéssim de tots els recursos, el paper d'aquests plans és catalitzar i dinamitzar la política de recerca perquè els grups catalans tinguin el màxim de recursos possibles d'Europa i de Madrid.

El tercer Pla de Recerca té dos eixos principals d'actuació, d'una banda, una política de recursos humans i, de l'altra, la creació de centres de recerca que puguin formar part de les xarxes que la Unió Europea vol impulsar en el VI programa marc. Què es pretén amb la prioritització d'aquests dos eixos?

A Catalunya hi ha grups molt bons, grups de qualitat, però fa falta tenir-ne més i tenir massa crítica, aquesta seria la nostra mancança. Hi ha dades com, per exemple, la despesa de Catalunya en relació al PIB que és de l'1,1% mentre que a Europa la mitjana és de l'1,8%, o el nombre d'investigadors per cada mil habitants de població activa, que a Catalunya és del 3,6% i a Europa del 5%. Això vol dir que hem de créixer, que tenim pocs investiga-

dors i que gastem poc en recerca, i per tant, l'objectiu principal del tercer Pla de Recerca és expandir el sistema de ciència i tecnologia de Catalunya, és a dir, tenir més investigadors i centres de recerca bons que puguin incorporar-se al nivell europeu.

Per tal d'incrementar el nombre d'investigadors de què disposa Catalunya, el conseller Mas-Colell ha parlat d'un nou model de contracte per als investigadors doctors basat en un programa de contractació continuada. Quins beneficis aportaria aquest model?

De fet podríem parlar de dos temes, d'una banda la creació de la Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), en la qual es contractarà laboralment investigadors formats fora

de Catalunya i que no poden tornar per la saturació de les plantilles universitàries. I d'altra banda, també per flexibilitzar el sistema de contractació que hi ha a Catalunya i a Espanya en general, s'han creat unes noves places d'associats habilitats amb les quals es pretén poder contractar investigadors amb unes condicions de flexibilitat més grans i racionalitzar així la carrera universitària i d'investigació que es fa a Catalunya.

Com incidirà el tercer Pla de Recerca en el desenvolupament de la supercomputació a Catalunya?

D'una banda, el tercer Pla de Recerca pretén mantenir i potenciar tots els grups bons que hi ha a Catalunya, i de grups que utilitzen la supercomputació en tenim de molt bons i aquests s'han de mantenir i per tant la supercomputació ha de ser-hi present per força. Però a més a més, una de les àrees concertades del tercer Pla de Recerca és la de la Societat de la Informació i, dins d'aquesta, una línia d'actuació explícita és la supercomputació. Un dels objectius clars del tercer pla és potenciar la supercomputació, tant pel que fa a recerca en supercomputació, com en el manteniment d'un bon servei que puguin utilitzar tots aquells usuaris que necessiten fer càlcul intensiu.

La creació de nous centres de recerca i l'impuls de la investigació en disciplines com la bioinformàtica, farà necessari l'augment dels recursos computacionals. Què hauríem de fer per incorporar-los com a usuaris nostres?

És cert que cada vegada hi ha més camps, com per exemple la bioinformàtica o la química teòrica aplicada a biomolècules, que necessiten cada cop més de la supercomputació. A Catalunya tenim bons grups en aquests camps i per tant hem de potenciar tots els centres, en particular el CESCO i també el CEPBA, que actualment donen servei de supercomputació als grups de Catalunya. Potenciar la supercomputació és l'única manera de mantenir aquests grups de recerca competitiu a nivell internacional.

Des de la Unió Europea es vol anar cap a un espai de recerca comú. Tenint en compte les actuals diferències entre països, quina és la via per fer realitat aquest Espai Europeu de Recerca? Quin ha de ser el posicionament de Catalunya?

La Unió Europea està preocupada perquè Europa està perdent pes respecte els EUA. La distància es va eixamplant, i, per tant, l'objectiu és constituir un Espai Europeu de Recerca coordinant millor la política europea de recerca amb les dels diferents estats membres: el mecanisme per fer-ho és el programa marc. En el sisè programa, que començarà el 2003, s'intentarà coordinar millor la política del propi pla amb la dels plans nacionals dels diferents països. Pel que fa a Catalunya, ha de ser-hi, ha de participar en aquest Espai Europeu de Recerca. Per tant, ja que una de les accions principals serà crear xarxes de centres d'excel·lència, Catalunya ne-

cessita centres que puguin ser nusos d'aquestes xarxes, i d'aquí ve una de les prioritats del tercer pla. Òbviament, si hem de contractar més investigadors i hem de crear centres d'excel·lència, això representa una major despesa i per tant hem de dedicar més recursos a l'R+D per aconseguir aquests objectius.

Si bé Catalunya és la segona comunitat autònoma en importància per la quantitat de fons europeus obtinguts, els fons que arriben d'altres organismes europeus són "molt minsos", com es diu en el tercer Pla de Recerca. Quins mecanismes cal posar en marxa per potenciar la participació de les empreses i dels grups catalans en les convocatòries d'institucions europees i establir col·laboracions per tal de poder-se beneficiar d'un major nombre de fons provinents de programes europeus?

ANTONI OLIVA I CUYÀS

va ser nomenat director de la CIRIT al juliol del 2000, un càrrec creat després de la constitució del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació al mes d'abril del mateix any.

Antoni Oliva és doctor en Ciències Químiques per la Universitat Autònoma de Barcelona i catedràtic de Química Física de la mateixa universitat. Ha exercit diferents càrrecs acadèmics, entre els quals, el de vicerector d'Investigació i de Política Científica de la UAB de 1990 a 1994, i el de degà de la Facultat de Ciències de la UAB de 1995 a 1999. Oliva ha fet tasques de recerca en el camp de la química teòrica i ha publicat més de 100 treballs en revistes científiques. És membre de diverses societats científiques, com ara la Societat Catalana de Ciències, la Real Sociedad Española de Química i la World Association of Theoretically Oriented Chemist (WATOC).

La CIRIT està presidida pel President de la Generalitat, mentre que el Conseller d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació n'ocupa la vicepresidència. Els objectius de la CIRIT i del seu director són l'elaboració del tercer Pla de Recerca, que es perllongarà del 2001 al 2004, la coordinació de l'activitat de recerca dels diferents departaments de la Generalitat, i també la interacció i la coordinació amb la política científica estatal i europea.



JORDI PARETO

D'una banda hi ha el programa marc, en el qual Espanya rep aproximadament el mateix que hi inverteix. Dintre d'Espanya, en el quart programa marc Catalunya va rebre el 18,8% que està una mica per sota del pes que té Catalunya a nivell universitari, investigador i industrial, que és una mica superior al 20%, tot i que a nivell de població no arriba al 16%. Però sorprèn molt que Madrid estigui al doble que nosaltres, i això vol dir que moltes de les indústries que tenen accés al programa marc estan a Madrid i que el Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC) i els altres Organismes Públics de Recerca (OPI) estan també molt concentrats a Madrid. D'altra banda és cert que, a banda del programa marc de la Unió Europea, hi ha una sèrie d'institucions europees com el CERN o l'Agència Europea de l'Espai (ESA), que fan contractes amb empreses i centres de recerca i, Catalunya, malauradament, en té pocs d'aquests contractes. La raó és que Catalunya no té pràcticament indústria aeroespacial, la qual cosa impossibilita que pugui tenir un bon nombre de contractes amb l'ESA. La manera de capgirar aquesta situació és impulsar que a Catalunya hi hagi empreses tecnològicament innovadores en el camp aeroespacial i en el de les noves tecnologies.

Les TIC s'han incorporat en diferents àrees de la societat durant els últims quatre anys. En quins àmbits cal potenciar-les en el proper quadrienni?

Les noves tecnologies de la informació i de la comunicació, que incideixen en tots els àmbits, constitueixen una prioritat clara del Govern de la Generalitat, el qual ha agafat el ferm compromís d'impulsar-les. El nostre departament, Universitats, Recerca i Societat de la Informació, té una secretaria que coordina totes les accions que es duen a terme a Catalunya en aquesta àrea, en col·laboració amb la resta de Departaments del Govern de la Generalitat. La Societat de la Informació és a més a més una àrea concertada del tercer Pla de Recerca amb l'objectiu de fomentar el seu ús en tots els àmbits de la nova societat del coneixement.



JORDI PARETO

El tercer pla anirà acompanyat d'un pla específic d'Innovació, gestionat pel Dept. d'Indústria, Comerç i Turisme mitjançant el Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial. Quins objectius es persegueixen en posar en marxa aquest pla d'Innovació?

Els dos anteriors plans de recerca eren especialment de recerca i desenvolupament encara que, en col·laboració amb el Dept. d'Indústria, també es fomentava que les empreses catalanes innovessin. Curiosament en l'acrònim de la CIRIT, creada l'any 1980, la segona "i" significa innovació, de la qual es parlava relativament poc fa vint anys i això posa de manifest l'encert i la visió de futur d'aquells que la van crear. A Europa hi ha l'anomenada paradoxa europea, és a dir, s'investiga bé, existeix una bona recerca bàsica i aplicada, però costa molt més que en el Japó o en els EUA que la recerca arribi al teixit productiu, al món de la indústria. I el mateix succeeix a Catalunya. Es va estudiar amb el Dept. d'Indústria la possibilitat de fer un pla d'R+D+I, però es va creure més convenient fer dos plans, un d'R+D, depenent del nostre Departament i un d'innovació que gestionés el Dept. d'Indústria. En el benentès que tots dos són plans del Govern de la Generalitat, i que han d'estar coordinats. Es tracta d'aconseguir que el sistema català d'R+D+I creixi i ens permeti estar entre els països més avançats d'Europa en aquest començament del segle XXI. ■

PROGRAMES DE MOBILITAT

Hans Vandierendonck, de la **Universiteit Gent** (Bèlgica), ha vingut convidat per Mateo Valero, de la UPC, per treballar en el projecte *Randomization in Multi-Banck Caches*. Vandierendonck va arribar l'1 de febrer i finalitzarà la seva estada l'1 de maig.

Mark Steinhaus, de la **Universität Karlsruhe** (Alemanya), ha vingut convidat per Josep Ll. Llariba, de la UPC, per participar en el projecte *Chip-space Estimation of Microprocessor Models*. Steinhaus hi ha treballat entre el 14 i el 28 de febrer.

Nicholas M. Harrison, del **Daresbury Laboratory** (Regne Unit), ha vingut convidat per Francesc Illas, de la UB, per participar en el projecte *Install and Run Parallel Version of CRISTAL98*. Harrison va arribar el 18 de març i marxarà el 8 d'abril.

Dario de Fazio, de la **Università di Perugia** (Itàlia), ha estat convidat per Antoni Aguilar, de la UB, per participar en el projecte *The Cl + H D → H Cl (D Cl) + H (D) Reaction: Open-shell, Spin-orbit and Long-range Effects*. De Fazio va arribar l'1 de març i treballarà en aquest projecte fins el 30 d'abril.

Bernhard U. Schatzschneider, del **Max-Planck-Institut für Strahlenchemie** (Alemanya), ha vingut convidat per Juan J. Novoa, de la UB, per participar en el projecte *Structural Dependence of the Exchange Coupling between Cu (II) and Coordinated Nitronyl Nitroxide Phenolates*. Schatzschneider hi ha treballat entre el 25 de febrer i el 25 de març.

John E. McGrady, de la **University of York** (Regne Unit), ha estat convidat per Agustí Lledós, de la UAB, per participar en el projecte *The Role of Non-singlet Spin States in Organometallic Reaction Mechanisms*. McGrady va arribar el 26 de març i treballarà en aquest projecte fins al 7 d'abril.

Nou web en el 10è aniversari

Amb motiu del seu 10è aniversari, el Centre de Supercomputació ha renovat la seva imatge a Internet. Des del 7 de març, data en què fa 10 anys es va signar el Conveni de creació del CESCO, els internautes accedeixen al nou web del Centre.

El juliol de 1995 va néixer el primer espai a Internet del CESCO. Dos anys després, l'abril de 1997, se'n feia la primera renovació. Tots dos amb un format similar, oferien a la pàgina principal un menú per començar la navegació per les diferents seccions. Coincidint amb la

celebració del 10è aniversari de la signatura del Conveni de creació del Centre, s'ha actualitzat el format del web. El principal canvi s'observa a la pàgina principal, en la qual el visitant obté ràpidament la informació més recent i de major interès, com si d'un diari es tractés.

Aquesta renovació ha estat el preludi de la celebració que tindrà lloc el proper 30 d'octubre, durant l'aniversari de la inauguració del Centre. Aquests actes coincidiran també amb la tercera edició de la Jornada Catalana de Supercomputació. ■



Nou programari quàntic a l'SP2

Des del 2 de febrer estan disponibles a l'IBM SP2 el programa de càlcul mecano quàntic POLYRATE i el conjunt de subrutines i *scripts* GAUSSRATE. Aquesta versió del programa es pot aplicar a reaccions en fase gas, fase sòlida i amb interfase gas-sòlid.

També a l'SP2 es va instal·lar la versió 4.0 del programa Cerius2-CASTEP el passat 17 de gener. CASTEP és un mòdul de mecànica quàntica integrat dins el paquet Cerius2 (MSI) de modelatge molecular. També al gener, el Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) va ampliar el nombre de mòduls disponibles del programa Catalyst (Molecular Simulations Inc.). Els nous mòduls incorporen les funcionalitats de generació d'hipòtesis (HypoGen i HipHop). ■

Tiscali-Nacamar s'incorpora al CATNIX

Des del 20 de març, CATNIX intercanvia tràfic Internet amb un nou operador. Tiscali-Nacamar Data Communications GmbH (societat matriu de World Online) s'hi ha connectat amb la voluntat de millorar l'accessibilitat als continguts per als seus usuaris. Actualment, hi ha 12 operadors i proveïdors al CATNIX.

Tiscali-Nacamar Data Communications GmbH, una organització alemanya que proveeix accés a Internet des del 1995, subministra la xarxa internacional al grup Tiscali en 15 països d'arreu del món, opera la seva pròpia xarxa troncal pan europea i ofereix serveis de telecomunicacions i d'Internet als seus usuaris a Europa. L'objectiu de Tiscali-Nacamar en connectar-se al CATNIX és augmentar la seva presència a l'Estat i millorar l'accessibilitat als continguts tant als seus clients com als altres proveïdors i operadors.

Pel que fa a l'Anella Científica, dues institucions han augmentat el seu cabal de connexió des de principis d'any. El Centre de Terminologia

(TERMCAT) va ampliar la seva connexió de 256 a 512 Kbps el 2 de març, mentre que l'Institut de Recerca Oncològica (IRO) va augmentar el seu cabal de connexió de 64 Kbps a 128 Kbps el passat 19 de gener.

L'IRO, creat l'any 1992, és una fundació privada que té com a objectiu principal la recerca bàsica, orientada a la permanent actualització de coneixements i a la innovació tecnològica, en benefici de les àrees en què treballa en el camp de les ciències de la salut. Aquest Institut s'estructura en cinc departaments: Receptors Cel·lulars, Càncer i Metàstasi, Genètica Molecular, Biologia Cel·lular i Criobiologia i Teràpia Cel·lular.

El TERMCAT, creat el 1985, és l'organisme encarregat de la coordinació general de les activitats terminològiques relatives a la llengua catalana, de la promoció, l'elaboració i la difusió de recursos terminològics, i impulsa el desenvolupament de productes d'enginyeria lingüística en què la terminologia té una especial incidència. ■

Huprines

Un nou pas cap al tractament de la malaltia d'Alzheimer?

Dr. Pelayo Camps

Dr. Francisco Javier Luque

Facultat de Farmàcia (UB)

Dr. Albert Badía

Facultat de Medicina (UAB)

La malaltia d'Alzheimer és un desordre neurodegeneratiu progressiu responsable del 50% dels casos de demència senil que afecta fins al 5% de les persones més grans de 65 anys i supera el 20% de les persones amb més de 80 anys. Al principi, hi ha pèrdues de memòria a curt termini i manca d'espontaneïtat, després

desorientació en l'espai, confusió mental i canvis de personalitat i, finalment esdevé la incapacitat mental completa, traduint-se en una dependència absoluta del pacient. Encara que la malaltia per si mateixa no és fatal, complicacions mèdiques associades, normalment infeccions víriques i bacterianes, provoquen la mort del pacient. De fet, aquesta malaltia representa la tercera causa de mortalitat en el món occidental, essent superada només per les malalties cardiovasculars i pel càncer. Tenint en compte l'increment de l'esperança de vida i els seus greus efectes tant a nivell personal, com familiar i social, tindrà sens dubte una incidència

molt important en els propers anys en els països desenvolupats.

S'han assenyalat alteracions genètiques i processos relacionats amb l'apoptosi neuronal com a factors desencadenants de la malaltia d'Alzheimer. La seva patologia es caracteritza per la deposició de la proteïna β -amiloide en plaques senils, i la formació de cabdells neurofibril·lars per hiperfosforilació de la proteïna tau. Tanmateix, és ben coneguda la seva relació amb dèficits en neurotransmissors, alteracions neurotròfiques, disfunció neuroimmunitària i processos neuroinflamatòris que finalment provoquen la mort accelerada de les neurones.

La major part de les estratègies per al tractament de la malaltia d'Alzheimer tenen com a dianes terapèutiques la proteïna β -amiloide (A β) i la neurotransmissió colinèrgica. En particular, la hipòtesi colinèrgica de la disfunció cognitiva postula que, almenys part del deteriorament cognitiu experimentat pels malalts d'Alzheimer, és conseqüència de la deficiència en el neurotransmissor acetilcolina (ACh), que té un paper important en la memòria. Encara que la transmissió colinèrgica pot ésser incrementada per fàrmacs que actuen a nivell presinàptic (precursors de colina, alliberadors d'ACh, antagonistes d'autoreceptors muscarínics presinàptics) i postsinàptic (agonistes muscarínics i nicotínics), els únics fàrmacs aprovats fins ara actuen a nivell sinàptic inhibint l'enzim acetilcolinesterasa (AChE), que és clau en la hidròlisi d'ACh. La seva inhibició incrementa la biodisponibilitat d'ACh en la sinapsi, millorant la transmissió colinèrgica. D'altra banda, atès que l'enzim es deposita a les plaques amiloïdes associat amb la proteïna A β , incrementant la seva neurotoxicitat, l'AChE podria tenir un paper patogènic en la malaltia d'Alzheimer.

El primer inhibidor de l'AChE aprovat per la FDA per al tractament de la malaltia d'Alzheimer fou tacrina (Cognex®, 1; figura 1). La seva elevada hepatotoxicitat i problemes gastrointestinals van fer que es retirés del mercat, però els seus efectes positius van estimular el desenvolupament d'altres inhibidors de l'AChE, com els ja comercialitzats donepezil (Aricept®, 2),

Figura 1

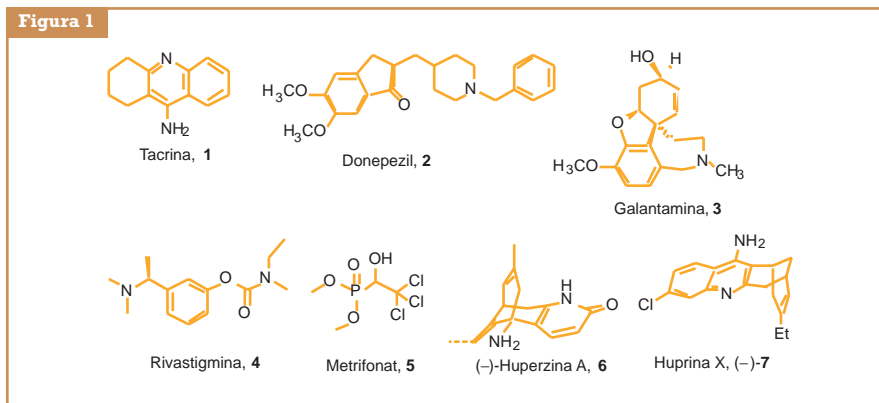
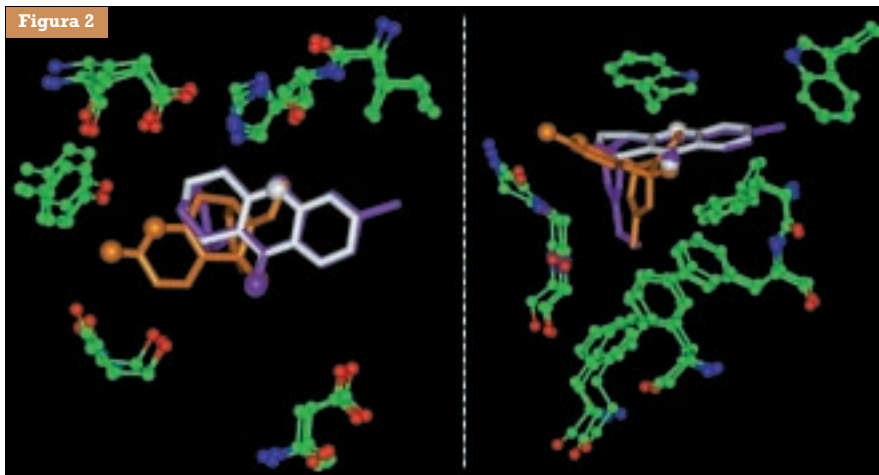


Figura 2



Vistes lateral (esquerra) i superior (dreta) del mode d'interacció entre Huperzina A (taronja), Tacrina (blanc) i Huperina (lila) amb el centre actiu de l'enzim Acetilcolinesterasa.



JORDI PARETO

Membres dels equips de recerca involucrats en l'estudi. D'esquerra a dreta, D. Muñoz (UB), J. Baños (UAB), E. Gómez (UB), P. Camps (UB), N. Vivas (UAB), X. Barril (UB), M. Orozco (UB) i F. J. Luque (UB).

galantamina (Remenyl®, 3), rivastigmina (Exelon®, 4) i metrifonat (Nivalin®, 5). Fins i tot la (-)-huperzina A (6), un alcaloide aïllat de la planta medicinal xinesa *Huperzia serrata*, s'està comercialitzant als EUA com a suplement dietètic (nutracèutic) per les seves propietats inhibidores de l'AChE i la seva acció neuroprotectiva (figura 1).

Fa deu anys els equips de recerca dels Prof. Pelayo Camps (Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona) i Albert Badia (Facultat de Medicina, Universitat Autònoma de Barcelona) van iniciar una recerca encaminada cap al desenvolupament de nous inhibidors de l'AChE basant-se en els models tacrina i huperzina A. Fruit d'aquesta recerca ha estat la síntesi d'una sèrie de compostos híbrids tacrina-huperzina A, que anomenem **huprines**, que presenten propietats farmacològiques potencialment interessants amb vista a la seva aplicació terapèutica.

Com a compostos quirals, la seva preparació va requerir un delicat protocol de síntesi, separació enantiomèrica i resolució cristal·logràfica,¹ que va permetre associar l'espècie més activa (eutòmer) a l'enantiòmer levorotatori. Els assaigs farmacològics duts a terme van identificar que l'enantiòmer levorotatori d'un d'aquests compostos, (huprina X) (-)-7 (figura 1), tenia propietats antiacetilcolinesteràsiques molt potents. Experiments realitzats en

col·laboració amb el Prof. Terrone L. Rosenberry (Clínica Mayo, Jacksonville, Florida, EUA) van demostrar que aquest compost és un inhibidor del tipus *tight-binding*, amb una constant d'inhibició de l'AChE humana subnanomolar (26 pM), que s'uneix fortament a l'enzim, la qual cosa allarga la durada de l'acció inhibidora.² De fet, la seva potència inhibidora és 1.200 vegades més gran que la corresponent a la tacrina, 140 vegades que a la de la huperzina A, i 40 vegades més gran que la del donepezil, l'inhibidor més selectiu aprovat actualment per a ús terapèutic. A més, la huprina X pot travessar la barrera hematoencefàlica i la seva toxicitat aguda és baixa.

Gràcies a un projecte de la Fundació La Marató de TV3 del 1996, els equips anteriors van començar a col·laborar amb els equips dels Profs. Francisco Javier Luque i Modesto Orozco (Facultats de Farmàcia i de Química, Universitat de Barcelona), especialistes en modelatge molecular.

Els estudis de simulació molecular duts a terme van permetre proposar un model molecular per al reconeixement d'huprines al centre actiu de l'enzim AChE. Aquest model va posar de manifest el caràcter híbrid de les huprines, ja que les subunitats 4-aminoquinolina i carbocíclica de l'enantiòmer levorotatori de les huprines en el centre d'unió de l'enzim ocupen essencialment el mateix entorn de les corresponents subunitats en tacrina i (-)-huperzina A (Figura 2).³⁻⁶ Tanmateix, aquest model ens ha permès racionalitzar els efectes de certes modificacions estructurals amb els canvis observats en la potència inhibidora, i ens ha permès dissenyar nous compostos que raonablement han d'ésser encara més actius com a inhibidors de l'AChE i que s'estan sintetitzant actualment.

Cal destacar que posteriorment, en una col·laboració amb l'equip del Prof. Joel L. Sussman (Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel), s'ha determinat experimentalment l'estructura de raigs X del complex AChE-huprina X,⁷ que concorda molt bé amb el model d'unió derivat dels càlculs de modelització molecular prèviament obtinguts.³⁻⁵

Queda ben palès, doncs, com les eines computacionals disponibles actualment per a la simulació de biomolècules, amb el suport de mitjans de computació intensiva, poden esdevenir un factor important per al desenvolupament de nous principis actius gràcies a la possibilitat d'establir relacions entre l'estructura química i la funció biològica i farmacològica. Sens dubte, la col·laboració establerta entre els grups experimentals i els equips teòrics de simulació molecular permetrà assolir noves fites en el disseny d'estratègies terapèutiques més eficients per al tractament d'aquesta greu malaltia. ■

¹ CAMPS, P.; et al. *Tetrahedron-Asymmetry*, 1998, 9, 835-849.

² CAMPS, P.; et al. *Molecular Pharmacology*, 2000, 57, 409-417.

³ CAMPS, P.; et al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 1999, 42, 3227-3242.

⁴ BARRIL, X.; et al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 1999, 42, 5110-5119.

⁵ CAMPS, P.; et al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 2000, 24, 4657-4666.

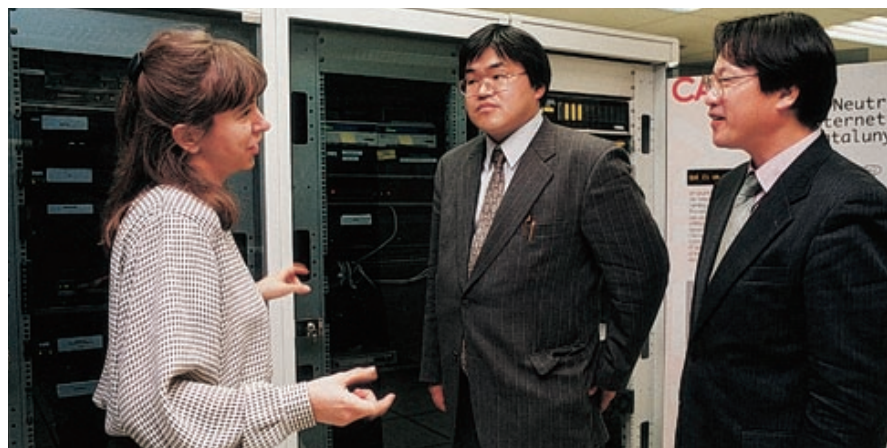
⁶ CAMPS, P.; et al. *US Patent*, 5,965,569, 1999, i d'altres països; assignada a Medichem S.A.

⁷ DVIR, H.; et al. *Molecular Pharmacology*, 2001, enviat per a publicar.

El CATNIX rep la visita d'una delegació japonesa

Al Japó s'està dissenyant la futura Ciutat de la Ciència Chusei Hoku-bu, un complex industrial, acadèmic i de recerca que pretén integrar en una mateixa àrea un ampli ventall d'activitats, principalment d'R+D. Una de les infraestructures de comunicacions de què disposarà aquesta Ciutat és un Punt

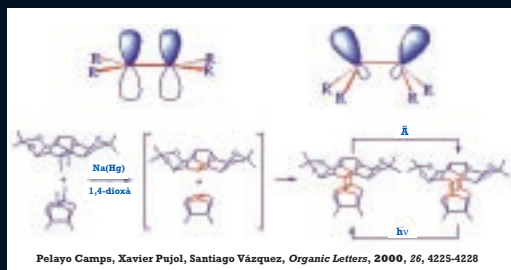
Neutre d'Internet. Per aquest motiu, el CESCA va rebre el passat 21 de febrer una delegació interessada en conèixer el funcionament del CATNIX. A més del Punt Neutre de Catalunya, els representants d'aquesta Ciutat de la Ciència han visitat el de Los Angeles, Nova York, Londres i Amsterdam. ■



JORDI PARETO

La delegació japonesa va mostrar molt d'interès en el Punt Neutre de Catalunya.

F O T O / N O T Í C I A



Pelayo Camps, Xavier Pujol, Santiago Vázquez, *Organic Letters*, 2000, 26, 4225-4228

La geometria ideal per a un doble enllaç és aquella en què els carbonis olefínics i els quatre substituents es troben en el mateix pla. La piramidalització distorsiona el doble enllaç de manera que els plans formats per cada-

un dels carbonis olefínics i els corresponents substituents perden coplanaritat. Mentre que els alquens reaccionen preferentment amb reactius electròfils, els alquens altament piramidalitzats experimenten addicions nucleòfiles, reaccions de Diels-Alder i, en absència d'altres reactius, dimeritzen per donar dímers ciclobutànics, els quals poden experimentar un procés de retrocicloaddició [2+2] que condueix a dímers diènics. Recentment el grup dirigit pel Dr. Pelayo Camps i format pel Dr. Santiago Vázquez i el Sr. Xavier Pujol, del Laboratori de Química Farmacèutica de la Facultat de Farmàcia de Barcelona, ha demostrat que és possible obtenir productes d'acoblament creuat de dos alquens piramidalitzats obrint la possibilitat d'utilitzar aquests alquens com a eines sintètiques per a la preparació de compostos policíclics més complexos.

Donada la inestabilitat dels alquens piramidalitzats, els càlculs ab initio esdevenen una eina fonamental per a entendre, justificar i preveure el seu comportament. D'altra banda, les entalpies de reacció experimentals per les retrocicloaddicions [2+2] s'ajusten satisfactòriament amb les calculades per mètodes ab initio i de mecànica molecular. A més, els càlculs posen de manifest que els dobles enllaços presents en els dímers diènics estan lleugerament piramidalitzats i que aquests són altament "hiperestables". ■

Edita



Patrocina



Generalitat de Catalunya



FUNDACIÓ CATALANA PER LA RECERCA

Universitat de Barcelona
Universitat Autònoma de Barcelona
Universitat Politècnica de Catalunya
Universitat Pompeu Fabra
Universitat de Girona
Universitat Rovira i Virgili
Universitat de Lleida
Universitat Oberta de Catalunya
CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

REDACCIÓ

Teresa Via

COL-LABORACIÓ

Gemma Mas

(TERMCAT)

Frank Rey

(Tiscali-Nacamar)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671