

TERAFLOP

A 3D molecular model of a protein structure. The protein backbone is represented by thick, smooth ribbons in shades of pink and blue. Various atoms are shown as small spheres in red, green, grey, and white, connected by thin lines to form ball-and-stick models of side chains. The background is dark, making the colorful protein structure stand out.

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

ENTREVISTA

Mateo Valero, director del BSC

Setena edició de la TSIUC

La campanya electoral,
preservada a PADICAT

10 anys de col·laboració de grups acadèmics i industrials en el disseny de fàrmacs

El 7 de novembre va celebrar-se el desè aniversari del Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF), un servei pioner i innovador a l'Estat que ha facilitat, tant al món acadèmic com a l'industrial, l'avenç en la recerca farmacològica. Aquesta jornada ha servit perquè els grups que en formen part comparteixin coneixements i experiències, així com debatin les seves necessitats de futur en una taula rodona en la qual han participat també les empreses que proveeixen programari a aquest servei, Accelrys i Tripos.

fàrmacs al mercat. Cal tenir en compte que el cicle de creació d'un fàrmac està al voltant d'uns 15 anys i, per aquest motiu, és difícil veure el resultat de la recerca. De fet, només en dues ocasions (vegeu *Teraflop 40 i 87*) s'havien publicat articles sobre la recerca duta a terme gràcies a l'SDF. Aquesta jornada, per tant, ha permès també conèixer algunes fites en recerca assolides.

Segons Huguet caldria usar l'experiència acumulada amb l'SDF a l'hora de plantejar noves iniciatives com ara l'Anella Industrial, que sembla que es vol impulsar en aquesta nova legislatura. Per a Huguet, "el receptari no és complex: cal buscar sinergies entre els participants amb voluntat de col·laborar i l'organitzador amb voluntat de servei, un nucli aglutinador, i un cofinançament clar i transparent".

Enric Banda: "L'SDF ha contribuït a enfortir el nostre sistema de recerca"

Enric Banda, director de la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació (FCRI), va ser l'encarregat de cloure aquesta jornada. Segons Banda, "no estariem parlant de l'actual debilitat del nostre sistema de recerca si tinguéssim un centenar d'SDF en els diferents sectors". A més, va afegir-hi, és precisament aquesta col·laboració la que es promou en el Pla estratègic de l'FCRI. Enric Banda va afirmar que "Catalunya és activa i emprenedora, però calen grans esforços per avançar molt poc i, en aquest sentit, l'SDF ha estat una activitat pionera".

En aquesta jornada es van mostrar algunes experiències d'ús del Servei de Disseny de Fàrmacs tant per part de la indústria, amb la participació de Robert Soliva, d'Uriach i Cia., i Rosalia Pascual, d'Esteve, i del món acadèmic, amb Arnau Cordomí, de la UPC. A més, en una taula rodona, diferents grups acadèmics i industrials i representants de proveïdors de programari van debatre les necessitats de futur en el disseny de fàrmacs. ■



D'esquerra a dreta, E. Quingles, X. Testar i M. Huguet, a l'obertura.

La jornada va ser inaugurada per Xavier Testar, director general de Recerca de la Generalitat de Catalunya; Ernest Quingles, sotsdirector general de Promoció i Infraestructures Tecnològiques i Grans Instal·lacions del Ministerio de Educació y Ciencia, i Miquel Huguet, director del CESCA. Com va explicar Ernest Quingles, els 10 anys d'activitat del servei demostren la seva consolidació avui dia. A més, va destacar especialment el valor d'haver trobat un llenguatge comú perquè la indústria i els grups acadèmics s'hagin pogut entendre tots aquests anys.

Quingles va explicar la preocupació del Ministerio de Educació y Ciencia per fer un salt qualitatiu i poder oferir eines per desenvolupar la recerca. De fet, va afegir-hi, que "s'està treballant amb el govern català per dissenyar un mapa d'in-

fraestructures tecnològiques, per tal de satisfer les necessitats de recerca acadèmica i empresarial a mitjà termini".

Xavier Testar va posar el Servei de Disseny de Fàrmacs com "un clar exemple de col·laboració entre la universitat, l'empresa i l'administració", i va destacar la necessitat de cooperar i de treballar a llarg termini per obtenir resultats en R+D. Testar va afirmar que el Pla de Recerca 2005-2008 és un bon full de ruta i es va mostrar confiat en la Llei de Recerca i Innovació, que ha de tirar endavant en aquesta legislatura.

Miquel Huguet va parlar dels orígens d'aquest servei i va remarcar la capacitat de col·laboració que havien tingut i continuen tenint els grups acadèmics i industrials que integren l'SDF, malgrat la forta competitivitat existent per posar nous

Future Needs in Drug Design



Drug discovery and development is a long process (10-15 years from idea to marketing of a drug), involving multidisciplinary approaches. The pharmaceutical industry is currently under a high pressure to deliver better and safer drugs for untreated diseases.

Computational chemistry, molecular modelling and cheminformatic techniques have been used since around 20 years ago in academic laboratories and in the pharmaceutical industry worldwide, with the aim to rationalize drug design and discovery, so that the time spent in this process may be shortened.

A roundtable was organized to close the workshop "10 years of the SDF" (Drug Design Service), with representatives from molecular modelling services provider companies (Veronique Monjardet, Tripos; and Remy Hoffmann, Accelrys), and from the academic (Leonardo Pardo, Universitat Autònoma Barcelona, UAB) and pharmaceutical industry (Manuel López, Almirall-Prodesfarma) research laboratories. The roundtable moderator was Jordi Quintana, from Esteve.

Veronique Monjardet (Tripos) presented a case study on virtual screening using a combination of several modelling and cheminformatic techniques. These computational technologies have been improving in predictability in the last years, and they are an alternative and complement to experimental approaches like combinatorial chemistry and high throughput screening. The combination of pharmacophore generation, database searching, docking and post-processing techniques offers a relevant pre-selection step in the processes of chemical libraries generation and acquisition of compounds for testing.

Remy Hoffmann (Accelrys) presented some new proposals for software tools that address the topic of "de novo" drug design based on fragments of chemical compounds available in databases, and chemical linkers that connect such fragments. The selection of fragments and linkers is based on their fitting to pharmacophores derived from either active ligands and/or the structural and functional characteristics of the active site of a protein target. An important consideration

in this software design approach is the issue of chemical reactivity of fragments and linkers, and the synthetic feasibility of the compounds designed through this process.

Leonardo Pardo (UAB) presented some defined needs for the design of drugs that interact with a large subset of the cellular proteins, the G-protein coupled receptors (GPCRs). These GPCR receptors are the targets of many drugs with large sales addressing important diseases in several therapeutic areas. It was emphasized that more crystal structures from these GPCR class are needed for better drug design, and that the mechanism of activation needs to be better understood from the pharmacological and computational perspectives. Finally, there is a need for the discovery of endogenous ligands and compounds interacting with a new set of GPCR targets, the orphan GPCRs.

Manuel López (Almirall-Prodesfarma) reviewed different approaches taken by the molecular modelling and cheminformatics practitioners in the last years, focusing mainly on the pharmacophore generation / database searching techniques, and on the virtual screening / docking of compounds in protein targets active sites. It was concluded that possibly a combination of these techniques, where pharmacophore constraints are introduced in the docking process, may afford better predictions for the analyses of ligand-receptor interactions of large numbers of compounds.

The discussion that followed the roundtable presentations covered mainly three areas:

a) further development of software tools for modelling and cheminformatics should be based on chemical and biological knowledge; an evolution of software tools from ligand design to drug design (including the areas of prediction of pharmacokinetics, metabolism, toxicology, safety) would be extremely useful;

b) the interaction of molecular modelling researchers with chemists and biologists should be improved, and molecular modelling tools should ideally be medicinal-chemistry driven; in this respect, software tools that facilitate the language of modelling to the chemists and the biologists, as well as the presentation of results in the two dimensional (2D) and three dimensional (3D) spaces would be desirable; and,

c) the future improvement of computational techniques used in drug design should include tools for the analysis of large number of experimental and computational results and data, so that conclusions may be derived that drive the next cycle of drug discovery.

Finally, initiatives like the SDF at CESCO may create the necessary synergies between academic and pharmaceutical industry laboratories, and software developers at service companies, to produce the new generation of tools needed for drug design. ■



From left to right: Monjardet, Hoffmann, Pardo and López. Stand, Jordi Quintana.



Directing the Whole of Modelling Repertoire Towards Understanding p38-Inhibitor Recognition

Robert Soliva

J. Uriach & Cia.



An ensemble of computational chemistry and biology techniques were used to gain insight on the molecular recognition of p38 MAP kinase and its relationship to other members of the same class of proteins in an attempt to facilitate the design of new, potent and selective inhibitors. This enzyme has a great potential as a therapeutic target for the treatment of different human inflammatory conditions such as rheumatoid arthritis, psoriasis and inflammatory bowel disease. Its involvement in these and other diseases is directly linked to the production of two pro-inflammatory cytokines, TNF- α and IL-1 β .

The availability of a few high resolution three dimensional structures of the enzyme in complex with different inhibitors, together with published work on several chemical scaffolds disclosed by different groups allowed to apply both ligand-based techniques such as pharmacophore modeling and alignment, and structure-based tools such as molecular interaction potential calculations, homology modeling, molecular dynamics and free energy calculations.

p38 MAP kinase catalyzes the transfer of a phosphate group from ATP, its cofactor, to a peptide substrate. Thus, its structure is such that two distinct binding sites must be offered for small molecules to bind the enzyme. One for ATP, the ATP binding site, and one for the peptide substrate. Thus, in principle, two different binding sites could be targeted in a traditional medicinal chemistry approach. However, because the substrate binding site is prepared for binding a peptide, there is a high concentration of hydrogen bond donors and acceptors, turning this site into a highly polar environment. Thus, in order to design tight binding compounds for this site, one must place many polar groups in a molecule, leading to undesirable chemical properties. This is the reason why most

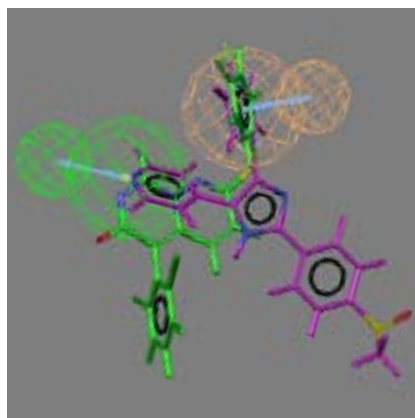


FIGURE 1. A correct 3D alignment of unrelated compounds SB-203580 (pink) and VX-745 (green) was generated by use of Catalyst before the crystal structure of VX-745 related compounds was published in the Protein Data Bank. This allowed to gain insight into the flexibility of the ATP binding site of the target protein.

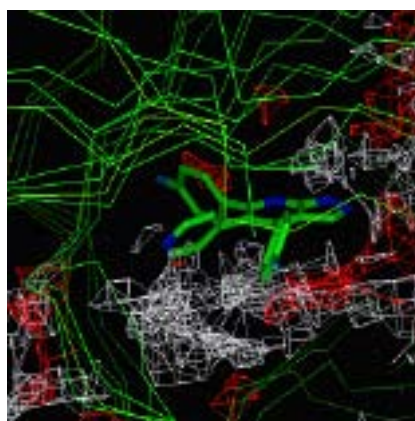


FIGURE 2. Representation of the -1.5 kcal/mol contour (neutral oxygen as probe) for p38 α MAP kinase (red) compared with other MAP kinases (white). The superposed backbones of the kinases are shown as reference (green wires).

kinase inhibitors are targeted to the ATP binding site, which is more hydrophobic, and as such is more amenable to inhibition by small organic molecules with more balanced physico-chemical properties.

One of the goals of the project was to produce a meaningful alignment of the different chemical series that had been published with activity against p38. In a structure-based context, this would mean to dock all compounds to the crystal structure of the target under study. However, present docking tools consider the biological receptor as rigid, and therefore induced fit, the deformation of the proteins' binding site in the presence of the inhibitor, is not taken into account properly. This leads to serious limitations when the different ligands interact with the same flexible region on the surface of the protein, since each chemical series leads to slightly different conformations of the protein. This was the case for compounds SB-203580 and VX-745 (see Figure 1). Although they bind in the same spot of the protein surface, a plausible pose could not be found for VX-745 by docking it to the structure of p38 bound to SB-203580. In this context, it was found that using alternative techniques such as pharmacophore alignment could be very helpful in generating putative binding modes (see Figure 1).

Because selectivity is a very important issue in the design of kinase inhibitors, another goal was to study the main recognition characteristics of the ATP binding site of p38 and to compare it with that of other members of the same enzyme class. To do so, many structures of different kinases, both solved experimentally and generated by homology modeling, were aligned based on their sequence alignment, and molecular interaction potentials with various probe particles were calculated (see Figure 2). This allowed to visually inspect the different recognition patterns of the ATP binding site of p38 with respect to closely related relatives (see Figure 2).

The application of a wide range of techniques allowed to shed light on various issues related to the development of different p38 inhibitor scaffolds. As has been the case in many previous studies, overall it was found that by using the whole of modeling repertoire one can derive meaningful and useful predictions. ■



Limitations of Current Parameters (Enrichment, GH) for the Evaluation of Pharmacophore Screening Performance

Rosalía Pascual
Esteve



The idea of simplifying a receptor to a geometric arrangement of features that account for the molecular receptor-ligand interactions may be very useful for drug discovery. However either the binding mode or more usually the three-dimensional structure of the receptor is often unknown and pharmacophoric models are derived by finding common features with a common spatial orientation in the multiconformational space of known ligands. Especially in these cases, the validation of the models obtained has a high interest and different metrics, also used and developed for other models of virtual screening, are applied. In this study the limitations of the two most commonly used parameters, enrichment and GH value will be analyzed.

First of all a HypoGen model for a particular target A using Catalyst with standard settings was derived. Homogeneous data of 23 structurally diverse compounds with a Ki affinity range of 6 log units were taken from the literature. The resulting model was able to reproduce the affinities with a correlation coefficient (r) of 0.93, an rms deviation of 1.11, and a cost difference 72, which represents a true correlation.

This model was then used to screen different datasets, one of them prospectively and the others retrospectively. On

the one hand we bought the 400 top scoring compounds of a commercial database and in parallel a diversity selection of 600 compounds, and on the other we analyzed the performance of the model in picking out hits of commercial collections of compounds that had been already acquired and tested as well as of internal compounds already designed by our medicinal chemists for that target. Differences in both the enrichment values and the GH values were observed. Whereas the differences in enrichment did reflect our appreciation of the model's achievement when looking at the number of active hits and the known hits of the dataset, this was not the case for the GH value.

In particular we observed that the GH value increased taking the same model and the same dataset and just lowering the activity cutoff value for considering a compound to be hit. This led us to analyze the formula of the GH value, equation 1, where Y is the number of active hits (H_a) divided by the total number of hits (H_t), A_p is the quotient of H_a by the total number of active compounds A , and D is the number of compounds in the dataset.

EQUATION 1

$$GH = \left[\frac{3}{4} \cdot Y(\%) + \frac{1}{4} \cdot A_p(\%) \right] \cdot \left[1 - \frac{H_t - H_a}{D - A} \right]$$

A random selection of compounds has probabilistically an enrichment value of one. Therefore in that case the following equality holds (equation 2) and substituting values in equation 1 we obtain the expression for the GH value of a random selection, GHr (equation 3), which has a value higher than zero when the number of hits is lower than the number of compounds in the dataset.

EQUATION 2

$$E = 1 \rightarrow \frac{H_a}{H_t} = \frac{A}{D} \rightarrow \begin{cases} Y(\%) = \frac{A}{D} \\ A_p(\%) = \frac{H_t}{D} \end{cases}$$

EQUATION 3

$$GH_r = \left[\frac{3}{4} \cdot \frac{A}{D} + \frac{1}{4} \cdot \frac{H_t}{D} \right] \cdot \left[1 - \frac{H_t}{D} \right]$$

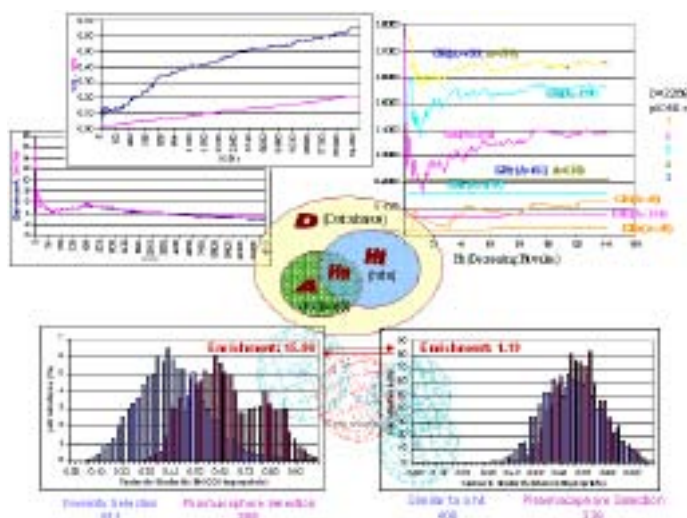
Further, being the number of compounds in the dataset and the number of hits constant for a specific virtual screening experiment, the derivative of GHr with respect to the number of active compounds, which varies depending on the cutoff, is given by the equation 4.

EQUATION 4

$$\frac{\partial}{\partial A} GH_r = \frac{3}{4} \cdot \frac{D - H_t}{D^2}$$

This expression is always positive for $H_t < D$. This confirms our observation that the GH value increases with the number of active compounds independently of the performance of the screening model. Taking the quotient of GH by GHr to cancel this effect leads us to an expression which is almost equal to the enrichment. Additionally we studied the influence of the number of hits on the GH value keeping the other variables constant, as this is the case when changing the cutoff of the scoring function for a particular run, and it turned out to be negligible.

An additional conclusion derived from the results of the comparative pharmacophoric screening among the different datasets was that the performance objectively measured in terms of enrichment depends on the diversity of the dataset. If the dataset is diverse the pharmacophore model will increase the density of active compounds, although maybe only around a very particular structural class. Otherwise if the diversity of the dataset is low, the model will either fail in recognizing the structural class as active, or it will be at the limit of detection, giving therefore only low enrichment values. ■





Descobriments de molècules bioactives mitjançant l'ús de bases de dades

Juan Jesús Pérez
UPC



La introducció al mercat d'un nou agent terapèutic és un procés llarg que dura una mitjana d'uns dotze anys i està associat a una despesa econòmica de l'ordre de 650 milions de dòlars. Amb aquestes xifres, qualsevol innovació que es faci en el procés pot estalviar temps i diners necessaris per disposar el més aviat possible de nous agents terapèutics i més barats al mercat. D'altra banda, les companyies farmacèutiques també tenen un gran interès en escurçar aquest temps, donada la competència que existeix entre elles, ja que s'estima que la primera companyia que treu un nou fàrmac al mercat pot recuperar la inversió feta en recerca en pocs mesos, la segona tarda poc menys d'un any i per a les següents aquest temps es va allargant en progressió geomètrica.

La recerca necessària per dissenyar un nou agent terapèutic té una etapa de descobriment i refinament de la molècula bioactiva i una etapa d'assaigs clínics. Si bé la segona té uns protocols molt ben establerts que no permeten cap estalvi, la primera permet la utilització d'eines innovadores que facilitin el procés. Sens dubte, una de les innovacions introduïdes els últims anys ha estat el disseny assistit per ordinador, que ha estat molt útil recentment per al disseny d'inhibidors de la proteasa del virus d'immunodeficiència humana i que és un dels components actius en la teràpia que s'utilitza per als malalts de SIDA.

L'aplicació de tècniques computacionals al disseny de fàrmacs es basa en el paradigma que els compostos actius exerceixen la seva acció biològica a través d'una macromolècula, coneguda com a diana terapèutica. Aquest paradigma implica, de forma simplificada, que l'activitat dels compostos actius vindrà determinada per la seva afinitat cap a la macromolècula objecte d'estudi. Per tant, el disseny ha d'estar orientat a trobar les característiques fisicoquímiques que modulen aquesta afinitat.

A nivell molecular, el problema es torna realment apassionant. Les macromolècules presenten un lloc específic per a la unió de la corresponent substància activa i el reconeixement entre elles passa a través de la seva complementarietat geomètrica i química. Aquesta complementarietat és semblant a la d'una clau i un pany, on a més a més, les puntes de la clau tenen colors diferents que s'han de fer coincidir amb els del pany. Per tant, el disseny es transforma en caracteritzar el centre actiu de la macromolècula i trobar molècules que hi encaixin.

Hi ha diverses formes experimentals de trobar molècules bioactives: ex-



tractes de plantes, verins animals, brous bacterians o mimètics de compostos o fragments que participen a les reaccions bioquímiques. Alternativament, hi ha tècniques *in silico* per trobar molècules bioactives. Probablement la més directa sigui la cerca de compostos en bases de dades tridimensionals. Per portar a terme aquesta tasca es necessita disposar d'una hipòtesi sobre les característiques del lloc actiu de la macromolècula corresponent a la diana terapèutica (farmacòfor) i una base de dades d'estructures tridimensionals. Les bases de dades típiques, encara que contenen de l'ordre dels 100.000 compostos, poden ser cercades de forma ràpida i efectiva. Primer, la cerca es fa de forma jeràrquica de manera que solament es calcula la diferència que hi ha entre cada molècula i el farmacòfor que s'utilitza com a plantilla una vegada s'ha comprovat que les molècules tenen tots els elements necessaris i, segon, el procés de cerca es pot paral·lelitzar.

Aquesta metodologia es pot utilitzar amb bases de dades existents al mercat o amb bases de dades provinents d'estudis de química combinatòria. Al mercat hi ha diferents bases de dades de diversos orígens, entre elles la NCI (National Cancer Institute), CA (Chemical Abstracts), ACD (Available Chemical Directory), Derwent, Cambridge Structure Data Base, etc. Aquest procediment permet descobrir diversos esquelets de compostos actius que poden arribar a ser agents terapèutics després de la seva optimització. ■

REFERÈNCIES

J.J. PÉREZ, F. CORCHO i O. LLORENS. "Molecular Modeling in the design of peptidomimetics and peptide surrogates". *Curr. Med. Chem.*, 9, 2209-2229 (2002)

J. J. PEREZ. "Managing molecular diversity". *Chem. Soc. Rev.*, 34, 143-152 (2005)

O. VILLACAÑAS, J. J. PÉREZ i J. RUBIO-MARTÍNEZ. "Structural analysis of the inhibition of Cdk4 and Cdk6 by p16 through molecular dynamics simulations". *J. Biomol. Struct. Dyn.*, 20, 347-358 (2002)

M. PINTO, J. J. PÉREZ i J. RUBIO-MARTÍNEZ. "Molecular dynamics study of different peptide segments of the BH3 domain of the proapoptotic proteins Bak, Bax, Bid and Bcl-2 bound to the Bcl-xL and Bcl-2 proteins". *J. Comp.-Aided Mol. Design*, 18, 12-22 (2004)

O. LLORENS, M. FILIZOLA, S. SPASIANI, M. MARASTONI, C. HERRANZ i J. J. PÉREZ. "Amygdalin binds to the CD4 receptor as suggested from molecular modeling studies". *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 8, 781-786 (1998)

E. ARAYA, A. RODRÍGUEZ, A. SPADA, J. JOGLAR, A. LLEBARIA, C. LAGUNAS, A. G. FERNÁNDEZ, S. SPISANI i J. J. PÉREZ. "Synthesis and Evaluation of Diverse Analogs of Amygdalin as Potential Peptidomimetics of Peptide". *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 15, 1493-1496 (2005)

A. BARONI, I. PAOLETTI, R. GRECO, R. A. SARTRIANO, E. RUOCCO, M. A. TUFANO i J. J. PÉREZ. "Immunodulatory effects of a set of amygdalin analogues on human keratinocyte cells". *Exp. Dermatol.*, 14, 854-859 (2005)

L'aprenentatge integrat a l'EEES: la confluència de recursos i tecnologia

TROBADA DELS SERVEIS INFORMÀTICS DE LES UNIVERSITATS DE CATALUNYA



Joan Viñas, a l'esquerra, i Josep Anton Ferré, a la dreta, durant l'obertura de la TSIUC.

El 9 de novembre es va celebrar la setena Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC), que convoca cada any el CESCA i que enguany va tenir lloc a la Universitat de Lleida (UdL). La trobada va estar dedicada a parlar sobre la integració de l'aprenentatge dins l'Espai Europeu d'Ensenyament Superior (EEES) i a debatre el paper dels serveis informàtics i les biblioteques en aquest marc.

Els encarregats d'obrir la trobada van ser Joan Viñas, rector de la UdL, i Josep Anton Ferré, director general d'Universitats de la Generalitat de Catalunya. Ferré va destacar que "un cop superat l'accés als recursos tecnològics, cal que els seus usuaris tinguin oportunitat d'integrar-los tal com demana l'EEES". A més, va afegir-hi que "per fer-ho, es requereix la implantació de polítiques de gestió que permetin garantir aquesta integració".

Per la seva part, Viñas va remarcar que "l'EEES és l'oportunitat de millorar la universitat, i els recursos de què es disposen són les eines i no el fi per arribar a aquesta consecució. Ara bé, és necessària una acció conjunta i interdisciplinària que apliqui les sinergies oportunes perquè aquest canvi esdevingui una realitat".

Per parlar de com, gràcies a l'adaptació de l'EEES, l'ensenyament universitari passa de ser un sistema basat en la docència a un sistema basat en l'aprenentatge,

la TSIUC va comptar amb la presentació de tres ponències. Terry Hanson, director de Sistemes d'Informació a la University of Chichester al Regne Unit, va parlar sobre la transformació de les biblioteques universitàries cap als anomenats Learning Resources Centres (centres de recursos d'aprenentatge). Miguel Ángel Marzal, professor a la Universidad Carlos III, va oferir una visió dels instruments necessaris per portar a terme aquest nou model educatiu que implica l'EEES i com s'està duent a terme a la seva universitat, mentre que Gabriel Ferraté, president de Caixa Tarragona i fundador de la Universitat Oberta de Catalunya, va explicar com la integració de les TIC i en concret la xarxa internet a la universitat ha permès configurar l'aprenentatge a distància, l'anomenat campus virtual, com un exemple d'aprenentatge continu i al llarg de la vida.

La TSIUC'06 va finalitzar amb una taula rodona on diversos representants

d'universitats i del món empresarial van debatre sobre aquest nou espai d'ensenyament i els canvis i noves infraestructures que comporta, així com el rol que han de prendre les biblioteques i el serveis informàtics en aquest espai.

En la cloenda, el director del CESCA, Miquel Huguet, va agrair l'assistència a les 100 persones que es van congreguar a la UdL i va remarcar que l'any 2006 ha estat un any de celebracions per al CESCA. "El dipòsit Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) fa 5 anys que dóna visibilitat a les tesis introduïdes, el Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF) porta 10 anys oferint serveis als laboratoris i grups acadèmics que l'integren (vegeu pàgina 2) i el CESCA, com a consorci, fa 15 anys que dóna serveis a la universitat i la recerca". Per a Huguet, "aquestes fites són exemples de la consolidació

És necessària una acció conjunta i interdisciplinària que apliqui les sinergies oportunes perquè la integració a l'EEES esdevingui una realitat

d'aquests serveis, que es van engegar cooperativament i que han crescut amb voluntat de compartir", i ha afegit que "és necessari buscar sinergies perquè el sistema universitari esdevingui més eficient".

La TSIUC'06 ha estat possible gràcies a la tasca duta a terme pel comitè de programa format per Lluís Anglada, del CBUC, Mercè Cabo, de la UPF, Cèsar Fernández, de la UdL, Antoni González, de la URV i Miquel Huguet, del CESCA. La trobada va comptar amb el patrocini de Hewlett-Packard i la col·laboració d'Al-Pi Telecomunicacions i la Universitat de Lleida. ■



Student-Centred Support for Student-Centred Learning: From Libraries to Learning Resources Centres

Terry Hanson

University College Chichester, UK

Since the mid-1980s there has been a move towards converged IT and Library services in British universities. This has taken two forms: service level convergence, driven by a desire to improve service to students, and the other motivated by strategic management considerations. It is the first of these that will be discussed below.

The Learning Resources Centre concept has been popular in Britain since the 1970s when audio visual materials and microform collections began to grow. Many librarians began to feel constrained by the traditional notion of the library and wanted a more inclusive, and forward-looking name. These feelings were strengthened enormously with the advent and rapid proliferation of personal computers and, somewhat later, the World Wide Web.

In the early days of personal computing students would go to PC 'laboratories' that were staffed by people from the computer services department. The new integrated services model recognised computer use by students as an integral part of the learning process, not a separate technical activity. It needed to be located in the same place as other learning resources and tools and it needed to be supported not by computer scientists but by multi-skilled

'information assistants' whose principal attributes were educational and service-oriented as well as technical.

Today virtually all British universities have adopted an integrated model of student support. They have brought together in one facility a broad range of services and facilities to improve convenience for the student and to encourage learning at both the individual and the group level. Many have adopted the Learning Resources Centre name. Others have used Learning Centre, Integrated Learning Centre, Information Commons or Learning Commons. Some universities have retained the Library name, albeit with a different, more inclusive, definition.

It is important to stress that the underlying concern among LRC managers has been to do with their role in the educational process as a whole, not just with the name. These concerns have always been part of professional debate in academic librarianship and in other support service areas but they have taken on greater importance with the development of new pedagogical models over the last twenty years or so. We have moved from an emphasis on teaching to an emphasis on learning. In the new model the teacher's

role changes to one of facilitation and design of learning processes and activities. In this learning-dominated environment the student is expected to take on more responsibility for his or her own learning, and this includes the selection of appropriate learning resources. Indeed the model is often referred to as Resource-Based Learning.

The implications for libraries and other support service departments of these changing pedagogical models are very significant. They offer an opportunity for greater involvement in the educational process and a responsibility for designing and managing a more exciting and more student-centred learning environment. The opportunity is for both a proactive and a reactive role. The former involves working with teachers to design learning activities around available resources and to take on a direct educational role, also in conjunction with teachers, in information literacy. The reactive role recognises that students need support in mediating the complex world of information resources and information technology. Indeed this may be the more important role as it is based on the student's own perception of need. Thus we should ensure that the front-line service model is capable of responding to the needs of students in both breadth, through multi-skilled 'Information Assistants', and in depth, through referral to the appropriate specialist.

The 21st century LRC is identical in concept to the 17th century library. Both have a dual role: they are repositories of learning resources and they are places to learn. What makes them different is that the range of learning resources is now much more extensive, the tools and facilities required go beyond a desk and chair to include a computer and, finally, the front-line staff role moves from a concern with security and silence to one of mediation and assistance. ■





Confluencia de servicios CRAI y ALFIN: instrumentos para un nuevo modelo educativo

Miguel Ángel Marzal

Universidad Carlos III

El CRAI, como concepto de servicios de información para una educación en entornos tecnológicos, así como espacio educativo de comunicación e infraestructura para el desarrollo curricular en estos mismos entornos, está sin duda asentado y suficientemente tratado, al menos en su marco conceptual. En cambio, el desarrollo de su diseño sigue un camino empírico de aplicación y actuación marcado unas veces por el marco legal educativo, el Espacio Europeo de Educación Superior (EEES), que acatan con mayor o menor entusiasmo las autoridades académicas, y otras, por la práctica profesional diaria en la laboriosa transformación desde las bibliotecas universitarias.

El problema recae sin embargo en la definición clara y precisa del objetivo educativo del CRAI. No existe en nuestra civilización 'occidental' un modelo de universidad, sino dos: el modelo anglosajón, británico en nuestro contexto, y el modelo continental, cuya línea divisoria se delineó en la Revolución Francesa. El modelo británico mantuvo un arquetipo medieval, con reformas sin rupturas, y el modelo continental se hizo decididamente 'napoleónico' en su servicio a un nuevo modelo de Estado y sociedad.

Las diferencias entre los dos modelos se ampliaron conforme cada uno se fue adaptando a sus propias sociedades. En el modelo universitario anglosajón o británico, las bibliotecas adquirieron una relevancia curricular que nunca tuvieron en el modelo continental. Por ello, y sin graves distorsiones en su función educativa, las bibliotecas anglosajonas sólo tuvieron que desarrollar la inoculación de las TIC para adaptarse y apoyar la Sociedad de la Información.



En el modelo continental la perplejidad procedió de la paradoja de definir su dimensión educativa, para luego desarrollar las herramientas *ad hoc*. Esto explica que aún en algunos lugares de España el diseño se centre en el espacio y en el intento de convertir antiguas funciones bibliotecarias en unas funciones CRAI con sólo una pátina de renovación tecnológica, aunque encontramos avances más lentos en otros lugares de la Unión Europea.

Se plantea así el problema de la imprescindible confluencia del CRAI con el modelo educativo como factor clave para una planificación estratégica sistémica. La formulación del problema no es fácil: ¿hacia qué modelo educativo tenemos que converger o confluir? La respuesta es terminante: hacia un modelo en el que predomine la educación sobre la enseñanza, un modelo que atienda la formación integral y el aprendizaje permanen-

te, integrando la web como espacio educativo. El modelo educativo reflejado en el EEES parece inclinarse a éste, sin embargo, es preciso pasar de los principios al desarrollo reglamentario.

El CRAI, sin duda, puede convertirse en el gran instrumento de cambio si confluye con la dimensión de la educación en tres planos:

a) CRAI como pilar de la enseñanza, como soporte necesario para el desarrollo pleno del 'Aula Extendida'. En este caso, el CRAI debe poner a disposición de la comunidad educativa los instrumentos de transferencia de conocimiento, es decir, aquellos que capten con semántica y significado recursos informativos digitales con vocación o interés educativo.

b) CRAI como pilar de la educación, referida a la formación íntegra y permanente, por lo que debe desarrollar instrumentos para la representación del conocimiento. El CRAI debe dar las pautas para una eficaz 'escritura web' mediante metadatos educativos, con el fin de generar el elemento clave de la confluencia CRAI y educación: los 'objetos de aprendizaje', con unos caracteres y funcionalidades bien determinados desde el CRAI.

c) El CRAI como centro mismo de educación, sin duda por efecto de la 'Alfabetización en información'. Al CRAI le corresponde la docencia de la competencia básica informativa, con su necesaria certificación o acreditación en el Suplemento de Título EEES. Sin embargo, es imprescindible definir el modelo ALFIN como competencia, paso necesario para su enunciación en materia curricular. El modelo competencial ALFIN se articula en tres grandes categorías (captación, fidelización y memoria), desarrolladas en habilidades y destrezas más específicas. ■



Aprendre en un món en xarxa: del metacampus a la metabiblioteca

Gabriel Ferraté
Caixa Tarragona

El coneixement i la informació són ara la nova força que mou el món, tan essencials com ho foren en el seu moment la terra, el treball i el capital. La societat del coneixement, a cavall entre les Tecnologies de la Informació i la Comunicació (TIC), està actuant com un revulsiu que fa canviar moltes idees i molts paradigmes que formen part de la concepció tradicional del nostre entorn. Per poder-nos desenvolupar i progressar en un entorn en què han canviat els paràmetres tradicionals necessitem 'saber' i, per tant, necessitem 'aprendre'. Això ens porta a la imperiosa necessitat, com a individus i com a societat, de saber comprendre, utilitzar i controlar les noves eines i els nous conceptes.

En el nou context, la generació, transmissió i adquisició de coneixements adquireixen una dimensió i una rellevància estratègiques. La irrupció de la Societat del Coneixement està modificant substancialment l'esquema dels processos educatius tradicionals, basats no tant en l'aprenentatge com en l'ensenyament.

L'aprenentatge en xarxa va més enllà de la simple reproducció dels models tradicionals de formació que només utilitzen la tecnologia per donar un 'toc de modernitat' al procés i continuar fent el mateix que sempre s'ha fet. No es tracta de convertir en una videoconferència la classe oral d'un professor, ni d'abocar a la xarxa els llibres i altres manuals d'ensenyament. El canvi és molt més complex i subtil.

Les noves tècniques informàtiques i pedagògiques permeten concebre materials interactius d'aprenentatge, amb processos de desplegament temàtic i conceptual automàticament adaptables al ritme, a la forma i fins i tot al nivell de resposta de l'usuari; en poques paraules, assolir un elevat grau de personalització. La formació en xarxa –o utilitzant la xarxa– afavoreix la creació de 'grups interactius virtuals', amb les corresponents possibili-

litats d'interacció i de cooperació entre els diversos components del grup corresponent.

Partint de la base que l'objectiu final és que l'estudiant aprengui, les TIC permeten avui dia trencar les barreres de temps i espai –i consti que no m'estic referint només a l'ensenyament anomenat 'a distància'– possibilitant la consecució de processos formatius –totals o complementaris– asíncrons, individualitzats, personalitzats, i interactius. Tot això, basat en els entorns virtuals –'campus virtuals' si així els volen anomenar– com a instruments que materialitzen el concepte abstracte de 'virtualitat'.

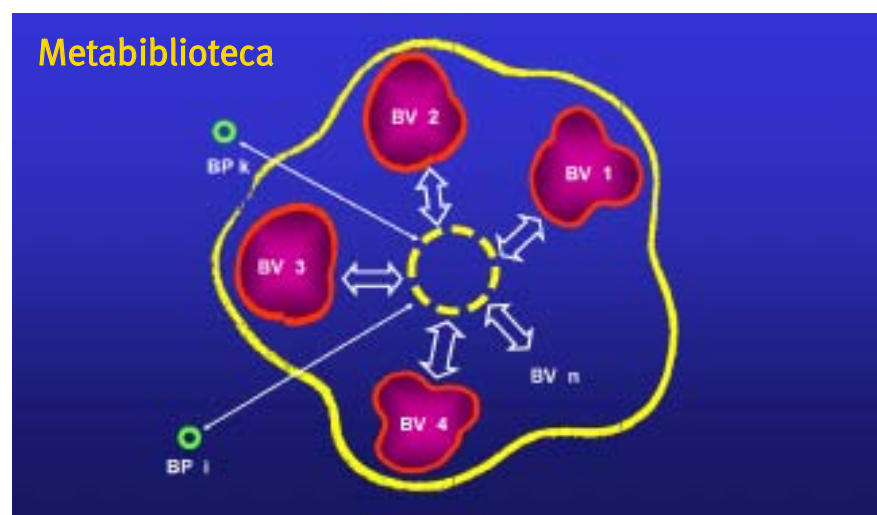
Així mateix, el 'metacampus', xarxa de campus virtuals –xarxa de xarxes– materialitza i instrumenta el concepte de globalitat, permetent la cooperació i la interacció entre usuaris d'ubicacions i d'entorns molt diversos, amb capacitat, fins i tot, de donar suport a la comunicació multilingüe, amb sistemes de traducció automàtica i multimodal (text, veu i imatge). La connexió universal i sense cables a la xarxa (holoconnectivitat) plasma el concepte d'ubiquïtat.

Si la biblioteca ha estat històricament un instrument bàsic en el món de la

cultura i de la formació, el seu concepte es transforma i s'amplia, esdevenint bàsic i central en els entorns d'aprenentatge en xarxa. Ja no es tracta solament d'un 'dipòsit' de materials impresos que són consultats *in situ* pels usuaris, sinó que el repte és ser capaç d'atendre les demandes personalitzades d'un entorn globalitzat, multilingüe i multiinstitucional, que precisa poder accedir, en qualsevol moment i des de qualsevol lloc, a una enorme i creixent quantitat d'informació (en formats molt diversos: text, àudio, vídeo, multimèdia, etc.) i en suports també molt diversificats.

Molts dels materials o de la informació que una biblioteca haurà de lliurar seran autoadaptables, i requeriran la possibilitat d'accés col·lateral a altres fonts d'informació, de procedència i naturalesa diversa. Per a la concepció dels nous materials didàctics i la seva gestió es requeriran també, de forma creixent, tècniques avançades d'intel·ligència artificial.

En poques paraules, globalitat, virtualitat i complexitat, en forma de biblioteques multidimensionals, i fins i tot personals, que operen i es relacionen en xarxa... El futur de la metabiblioteca ha començat ja!



Nou espai d'ensenyament, noves infraestructures? TSIUC'06

L'esperit de l'EEES reforça la necessitat d'un ús més intensiu dels recursos i serveis que la universitat posa a l'abast dels professors i estudiants. Per això, és necessari organitzar serveis de suport a l'aprenentatge i a la docència que cobreixin les necessitats derivades de l'EEES que han d'implementar tots els professionals directament involucrats, com ara informàtics, bibliotecaris, pedagogs, tècnics, etc.

La taula rodona de la TSIUC, moderada per Cèsar Fernández, va recollir, d'una banda, els canvis necessaris per a la implementació d'aquest nou espai d'ensenyament basat en l'aprenentatge que proposa l'EEES i, de l'altra, les noves infraestructures que calen per aconseguir conformar-lo.

Ernest Abadal, adjunt al Vicerectorat de Política Docent per a Sistemes d'Informació i Documentació de la UB, va abordar l'impacte de l'EEES en les infraestructures des d'un punt de vista institucional. En primer lloc, va descriure les característiques del nou model educatiu i dels canvis que suposa principalment per a l'alumnat i el professorat. En segon lloc, va referir-se a les accions polítiques que estan portant a terme les universitats en general per impulsar l'EEES, com ara la creació d'unitats de suport a la docència (per ajudar el professor a la creació del material docent), el foment als grups d'innovació docent, la revisió i adaptació de la normativa d'avaluació, etc. En tercer lloc, va descriure els principals àmbits als quals afectarà el nou model educatiu: edificis, infraestructura tecnològica, creació de continguts, integració de serveis (biblioteques, aules informàtiques, autoaprenentatge, etc., al CRAI), serveis d'informació centralitzats, etc. i la necessitat de disposar de tot el suport de les Unitats de Tecnologia de les universitats per poder dur a terme tots aquests canvis.

Mercè Cabo, vicegerent de l'Àrea de Recursos d'Informació de la UPF, va definir el CRAI com un lloc físic on s'integren els serveis de suport a l'aprenentatge, a la docència i a la recerca i on els professionals responsables de la presentació d'aquests serveis treballen conjuntament. La creació del CRAI permet compartir equips, ampliar horaris i augmentar i millorar la prestació dels serveis adreçats a professors i estudiants. Trobem exemples de CRAI (Learning Resources Center)

a les universitats anglosaxones i nord-americanes, principalment. Ara bé, no hi ha un sol model d'organització del CRAI, sinó molts, cadascun en consonància amb la història, trajectòria i característiques de cada universitat. Els models organitzatius van des de la integració absoluta, fins a una direcció gerencial i política comuna en què els serveis, tot i compartir espais, mantenen la seva independència, amb fórmules intermèdies ben variades. En tots els casos, però, es donen estructures menys jerarquitzades que permeten el treball conjunt dels professionals directament involucrats en la prestació de serveis de suport a l'aprenentatge, la docència i la recerca. En tots els casos, doncs, el treball col·laboratiu és l'element clau que marca la diferència.

Dídac Lòpez, cap dels Serveis Informàtics de la UdG, va parlar sobre el camí a seguir en la implantació aquestes infraestructures, tal com demana l'EEES. Una de les tasques principals que hauran de fer els serveis informàtics és gestionar els objectes d'aprenentatge i donar suport al docent i a l'alumne a nivell acadèmic. Per fer-ho, caldrà començar a assumir nous rols i a implementar eines de manera diferent a com s'havia fet fins ara. A més, es farà necessària la creació d'una nova figura, el gestor d'informació, que

s'encarregarà d'aquesta implantació així com de controlar tot el procés. Però, tot i així, la universitat no podrà emprendre aquest camí tota sola i necessitarà establir sinergies, crear canals de cooperació i col·laborar amb la resta d'universitats. Per a que això sigui possible els serveis informàtics hauran de canviar la manera de relacionar-se amb els seus usuaris i aprendre a treballar de forma transversal.

Carlos Santamaría, director de Màrqueting per al Sector Públic a HP, va donar una visió de com el món empresarial pot col·laborar activament amb el món acadèmic, ajudant-lo a millorar les seves infraestructures. A més, el mercat europeu de lliure competència que comporta l'EEES i que permet que l'estudiant pugui escollir en quina universitat cursar els seus estudis, farà que les universitats s'hagin d'esforçar en oferir més i millors serveis i, en conseqüència, hagin d'augmentar la qualitat. I és en aquest àmbit on la universitat podrà crear sinergies amb l'empresa, de manera que aquesta última esdevingui soci tecnològic, ajudi a la captació de nous alumnes o ofereixi formació continuada als treballadors.

Per tant, la introducció d'un nou model d'ensenyament basat en l'aprenentatge afectarà tota la comunitat universitària i comportarà la plena integració de les tecnologies de la informació i les comunicacions en el sistema educatiu. Però, perquè aquest canvi esdevingui una realitat, caldrà crear models de gestió menys funcionals i més matricials que permetin desenvolupar aquest espai conjunt amb eficiència. ■



D'esquerra a dreta, Mercè Cabo, Ernest Abadal, Cèsar Fernández, Dídac Lòpez i Carlos Santamaría.



ENTREVISTA A MATEO VALERO, DIRECTOR DEL BSC

Mateo Valero, Premi de la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació

Fa 32 anys, Mateo Valero, amb la carrera en Telecomunicacions acabada a Madrid, va prendre “una decisió molt encertada”. Potser l’entusiasme amb què Miguel Ángel Lagunas, també enginyer en Telecomunicacions, va parlar-li de la jove Escola de Telecomunicacions, va fer que decidís incorporar-s’hi i començar la seva carrera professional a la ciutat comtal. Així, va encetar una trajectòria que l’ha portat a estar al capdavant del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC).

El passat 17 d’octubre, Valero va rebre el Premi de la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació (FCRI) “per les seves rellevants contribucions científiques a l’arquitectura de computadors i per la seva tasca de desenvolupament i promoció internacional de la supercomputació”. A la fi de setembre, a més, havia estat distingit pel Ministerio de Ciencia i Tecnologia amb el Premio nacional de investigación “Leonardo Torres Quevedo” en Enginyeria.

■ Què representen aquests premis?

Aquest tipus de premis són per reconèixer el treball a una carrera dedicada a la recerca. La societat reconeix les persones de manera individualment, però tant les institucions que donen el reconeixement com els premiats som una mica injustos, ja que el treball ha estat realitzat per moltíssimes persones. En el meu cas, és un reconeixement als meus col·laboradors, entre els quals destaco els meus alumnes de doctorat i a tots els agraeixo i els dedico aquests i tots els altres premis. Per descomptat, la família juga un paper fonamental en el sacrifici de les incomptables hores a la qual s’hi ha de dedi-

car de dedicar. En el meu cas, és un premi també a l’Àngela i el Xavier, que m’han ajudat en tot moment.

Vostè va néixer a Alfamén (Saragossa), va estudiar a Madrid i va venir a Barcelona, on es va incorporar a la UPC com a professor i va fer el doctorat. Com va ser aquesta arribada a la ciutat comtal?

Vaig venir-hi amb molta il·lusió i n’estic molt satisfet. Va ser una decisió molt encertada. En aquell moment, amb 21 anys, tenia el títol d’Enginyer de Telecomunicació i opcions per treballar als EUA i a Madrid. El meu amic personal Miguel Ángel Lagunas, Premi de l’FCRI 2004, i que havia acabat la carrera un any abans, ha-

via vingut a la jove Escola de Telecomunicacions, a Terrassa. Durant el meu últim curs, ens vam trobar un dia a Madrid, i me’n va parlar molt il·lusionat, així que vaig decidir venir-hi. M’agradava la docència i la recerca i pensava que un centre nou era millor que un altre on la plantilla estava plena. A més, jo era un enamorat de Joan Manuel Serrat, de qui sabia moltes de les seves cançons en català, també de Barcelona, on havia vingut alguna vegada i, des dels 5 anys, era un fanàtic del Barça. Encara avui continuo amb els mateixos tres gustos, a banda de molts d’altres que he après a valorar en aquesta magnífica terra.

Com ha vist canviar la supercomputació des de la seva arribada a la UPC?

La meua experiència se centra sobretot en l'arquitectura dels computadors, que són la base per construir sistemes amb milers de processadors que quan intercanvien informació entre ells i a molt alta velocitat i, per tant, col·laboren en l'execució del mateix problema, es denominen supercomputadors. Quan vaig arribar a la UPC l'any 1974, quasi no hi havia computadors. A l'Escola de Telecomunicacions, teníem un PDP 11-20, de Digital. El 1971 havia estat dissenyat el primer microprocessador, l'Intel 4004, i vaig començar a llegir-ne els manuals. El 1979 va aparèixer el primer supercomputador reconegut, el Cray 1, amb un processador que li proporcionava una velocitat de 160 Mflop/s. Qualsevol dels xips actuals són més de 100 vegades més ràpids que aquest Cray 1 que costava 10 milions d'euros dels d'aleshores, davant dels 1.000 euros dels xips *multicore* actuals. El canvi ha estat enorme.

L'any 1985, essent degà de la Facultat d'Informàtica, vam comprar un VAX 11-780, que executava un Mflop/s, 20.000 vegades menys que alguns xips actuals i que costava, el sistema, mig milió d'euros. El 1984, la FIB va adquirir 64 processadors Transputer, que ens van permetre ser els primers universitaris en començar a investigar i usar computadors paral·lels. El Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA) va ser creat el 1991 per ser el primer centre de recerca en computadors paral·lels, i va adquirir un Convex amb 8 processadors vectorials que donaven una potència global de 400 Mflop/s. Cada un dels més de 10.000 processadors del MareNostrum són més de 25 vegades més ràpids. I, per cert, vam pagar un milió de dòlars pel Convex.

Des del 1991, hem tingut computadors diversos al CEPBA. Tenim una especial estimació als sistemes multiprocessadors basats en els Alpha de Digital, i els Origin, d'SGI. Aquest, pioner en sistemes amb memòria comuna, va ser la base del CEPBA durant 8 anys. En crear el CEPBA-IBM Research Institute (CIRI), vam començar a tenir màquines IBM. L'última tenia 128 processadors amb memòria compartida. Amb l'arribada del MareNostrum i la creació del BSC, vam passar a tenir una potència de més de 40 Tflop/s, equivalent a més de 100 vegades més que l'IBM. El salt en aquests anys ha estat espectacular i continuarà durant els propers.

Cap a on evolucionarà la tecnologia de supercomputació en els propers anys?

Hi ha diferents aspectes que hem de tenir en compte. Els processadors individuals del futur ja no seran molt més ràpids. La llei de Moore, que estableix la tendència de seguir augmentant la densitat dels transistors en un xip –recentment doblar cada dos anys, en lloc de cada 18 mesos– continuarà durant uns 15 anys més. Així, tenim dues formes d'augmentar la velocitat: incrementant el nombre de processadors que treballen conjuntament i especialitzant el maquinari per fer-lo més eficient.

“Estem dissenyant, en col·laboració amb IBM, un supercomputador basat en el Cell que pugui superar la barrera del Pflop/s”

Avui dia ja són una realitat els xips amb diversos processadors. Al final de la llei de Moore, segurament tindrem xips amb varis centenars de processadors amb potència similar als actuals. Un possible MareNostrum del futur podria tenir en la mateixa estructura i grandària, uns pocs milions de processadors amb una velocitat d'alguns centenars de Pflop/s i alguns PB de memòria.

També hi ha xips amb diversos processadors on alguns estan especialitzats en executar algunes aplicacions més ràpid. El Cell d'IBM té un processador mestre i 8 esclaus especialitzats per executar molt eficientment els jocs de la futura PS3 de Sony, o els algorismes de vídeo de la televisió d'alta definició de Toshiba. Altres alternatives són les *Field-programmable gate array* de supercomputadors com ara el Tsubame de Sun. L'especialització serà l'altra forma complementària per augmentar la velocitat.

Fa 15 anys va ser promotor i director del CEPBA. Quines fites va assolir?

El CEPBA, com el BSC, va ser possible gràcies a la col·laboració del govern central, la Generalitat i la UPC. El CEPBA, va ser pioner en temes de docència, transferència de tecnologia i recerca d'alta qualitat, i va ser el responsable directe de que després existissin el CIRI i ara el BSC. A nivell

docent, vam impartir molts cursos a nivell nacional i internacional relacionats amb el maquinari, el programari de base i les aplicacions dels computadors paral·lels. Moltes d'aquestes tècniques formen part avui de cursos universitaris. A nivell de servei, vam donar una assistència diferencial als usuaris, ja que vam ajudar als que ho van demanar a millorar les seves aplicacions paral·leles.

El CEPBA va ser un catalitzador d'empreses i centres de recerca en els programes de la UE. Vam participar en més de 50 projectes europeus, amb més de 200 empreses i grups de recerca. Vam ser promotors d'iniciatives de desenvolupament d'aplicacions paral·leles a la UE, com PACOS i PCI-II. Vam ser escollits un dels Technology Transfer Nodes d'Europa. En recerca, vam realitzar contribucions en les millors revistes i congressos mundials i vam ser reconeguts internacionalment. Vam desenvolupar eines per ajudar a la programació i millorar el rendiment dels supercomputadors. Tota aquesta feina ha estat realitzada per moltes persones i, en el cas del CEPBA, el doctor Jesús Labarta, que n'ha estat el director durant aquests anys, i el seu equip, ho han fet possible. La majoria continuen col·laborant amb el BSC.

Quin balanç fa dels primers dos anys de funcionament del BSC? Quantes persones hi estan treballant? Quants usuaris?

Oficialment, només portem un any i mig. En aquest temps, hem posat en marxa el Comitè d'Accés per als usuaris, integrat per 40 experts que decideixen els projectes que usaran el MareNostrum. Hi ha més de 150 grups de tot el món que l'usen. Hem executat veritables reptes computacionals a nivell mundial i hem ajudat a fer millor recerca. Hem connectat el centre als grans centres europeus a través de DEISA, entre altres. Continuem amb el programa de mobilitat, complementat amb l'intern estatal. Estem atraient empreses com Repsol, a la que ajudarem a trobar petroli al Golf de Mèxic. La veritat és que ni en els moments de més optimisme pensava que poguéssim arribar a fer la meitat del que hem obtingut. Per tot això, ja som més de 160 persones les que treballam al BSC. I anem creixent, malgrat el problema que tenim és la manca d'espai. **El BSC investiga en tres àrees: ciències computacionals, de la vida i de la Terra. Quins reptes n'espera assolir?**

En ciències de la computació, tenim com a directores els doctors Jesús Labarta i

Eduard Aiguadé i investiguem sobre les arquitectures dels computadors d'altres prestacions així com en programari de base i d'aplicacions d'aquests computadors paral·lels. Aquesta recerca es fa en col·laboració amb empreses líders com IBM, Microsoft i Sun, i amb els millors grups de recerca i empreses d'Europa com Nokia, ST-Microelectrónica i Philips. Amb IBM, per exemple, treballem en el disseny d'un computador amb una velocitat superior al Pflop/s i, amb Microsoft, en el disseny de programari i de futurs xips que contindran centenars de processadors.

El programa de ciències de la vida, coordinat pel doctor Modesto Orozco, es beneficia de la potència del MareNostrum per obtenir una comprensió més profunda del comportament dels organismes vius. Les àrees d'interès inclouen anàlisi genòmic, mineria de dades biològiques, biologia de sistemes, estudi mecànics i dinàmic de macromolècules, predicció del plegament de proteïnes, anàlisi dels mecanismes d'acció enzimàtics i disseny de fàrmacs, entre altres.

Els principals projectes en l'àrea de ciències de la Terra, dirigida pel doctor José María Baldasano, se centren en l'estudi de la qualitat de l'aire, la contaminació fotoquímica i els aerosols, on s'està col·laborant amb el Ministerio de Medio Ambiente. Pel que fa al canvi climàtic, es col·labora amb la NASA; i l'Institut Nacional de Meteorologia i l'Organización Mundial Meteorológica estan usant un sistema de pronòstic en l'emissió i el transport de pols natural des d'àrees desèrtiques. Especialment important és, a més, la col·laboració a Catalunya entre els investigadors de la Bioregió i els del BSC.

Recentment s'ha adjudicat un concurs a SGI per adquirir un sistema de memòria compartida amb 64 processadors. Com complementarà el MareNostrum?

Una màquina amb memòria comuna està formada per varis processadors amb accés directe a tota la memòria central. En teoria, permet que la programació sigui més senzilla, usant per exemple el model de programació OpenMP. No obstant això, els sistemes amb memòria comuna no són escalables per fer supercomputadors molt ràpids, són més cars que els equivalents de memòria privada, i consumeixen molta més potència elèctrica. Per això no hi ha cap màquina al TOP500 que sigui només de memòria comuna pura.

D'altra banda, l'avantatge que poden tenir a l'hora de programar-les es pot posar en dubte si considerem aplicacions a executar en un nombre molt gran de processadors. D'aquí que tots els supercomputadors estiguin construïts a partir d'un conjunt de nodes de memòria comuna, interconnectats a través de pas de missatges. El MareNostrum inicial tenia 2.282 nodes de memòria comuna, cada un amb dos processadors i 4 GB de memòria comuna. Els nodes es connectaven a través de pas de missatges explicitats pel programador mitjançant les primitives que contenen models de programació com MPI. Tenim altres exemples com el Tsubame, amb 665 nodes de 16 processadors cada un que comparteixen 32 GB de memòria, i que és el novè al TOP500; i el Columbia, al vuitè lloc i amb 20 nodes amb 512 processadors, que comparteixen un TB de memòria.

Dit això, hem comprat un computador de 128 processadors amb 512 GB de memòria central perquè, fonamentalment, necessitem fer recerca en el disseny dels xips del futur que contindran centenars de processadors i, segurament, algun mecanisme de memòria comuna, i necessitem una plataforma que substituïsi l'IBM que hem tingut durant els últims 6 anys. Tot i que ja hi ha a Espanya màquines de memòria comuna amb 2 TB per a aplicacions comercials, no és el nostre objectiu competir-hi. A més, hem adquirit un robot de 6 PB i una altra màquina per a la gestió de bases de dades biològiques i de medi ambient. Tot això fa que el BSC tingui un bon maquinari i programari que, juntament amb l'excel·lent equip humà, ofereixi un servei molt bo a la societat investigadora.

Quins plans hi ha previstos per a la renovació tecnològica del MareNostrum?

A mitjà termini, estem dissenyant amb IBM un supercomputador basat en el Cell que superi el Pflop/s. Aquest és un repte molt gran ja que hem de proposar el disseny d'un xip sencer, i tot el tema de memòria i xarxa dintre del *blade* i la xarxa d'interconnexió entre *blades*. Esperem tenir-ho abans de 3 anys. També treballem en altres alternatives tecnològiques.

De moment, hem actualitzat el MareNostrum inicial, aprofitant l'existència de xips amb varis processadors. La màquina actual té 10.240 processadors, una velocitat de 94,21 Tflop/s i una memòria principal de 20 TB. Està formada per 2.560 nodes de memòria comuna amb 4 processadors i 8 GB de memòria comuna cada un. Vam passar el test *Linpack* amb 10.000 processadors i vam obtenir una velocitat de 62,63 Tflop/s, que ens situa un altre cop com els primers d'Europa i els cinquens del món. El test ha estat dissenyat i optimitzat pels equips dels doctors Sergi Girona, responsable de la instal·lació, José María Cella, director d'aplicacions, i Jesús Labarta.

El MareNostrum inicial s'ha reinstal·lat de manera distribuïda. A Madrid, se n'ha instal·lat la meitat i s'ha aconseguit que es posés el número 34 a nivell mundial i entre els deu primers a Europa. La resta s'ha ubicat a Santander, Saragossa, Màlaga i a Canàries. Aquestes màquines estan entre les posicions 413 i 417 del TOP500, de forma que per primera vegada, hi tenim 7 màquines que, a més, estaran connectades a través de RedIRIS de manera que el seu ús serà coordinat i permetran fer recerca en *grid*. ■



Mateo Valero va rebre el Premi de l'FCRI el passat 17 d'octubre.

MareNostrum torna a situar-se primer d'Europa a la llista TOP500

El MareNostrum s'ha situat un altre cop com el sistema més potent d'Europa i el cinquè del món a la darrera edició de la llista TOP500 publicada el passat mes de novembre a Tampa (Florida). Aquesta pujada en la llista s'ha degut a l'ampliació del supercomputador, que ha duplicat la seva capacitat de càlcul de 42,35 a 94,21 Tflop/s. El primer lloc continua dominat pel sistema Blue Gene/L d'IBM que ja porta quatre edicions consecutives encapçalant la llista dels 500 supercomputadors més potents del món.

El supercomputador del Barcelona Supercomputing Center (BSC) s'ha col·locat primer d'Europa, tal com ja ho va fer al novembre de 2004, i cinquè del món després de passar de 4.812 a 10.240 processadors, que aporten una potència de càlcul de 94,21 Tflop/s. MareNostrum no és l'únic sistema de l'Estat present a les 10 primeres posicions europees, el BladeCenter JS20 Cluster del Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMA) amb 2.408 processadors del MareNostrum original ha entrat en novè lloc al rànquing europeu i en 34a posició a la llista, amb una capacitat de càlcul de 21,19 Tflop/s.

MareNostrum ha duplicat la seva capacitat de càlcul

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

TOP10

El TOP10 continua liderat per BlueGene/L, el supercomputador desenvolupat per IBM i la National Nuclear Security Administration (NNSA) dels EUA que està instal·lat al Lawrence Livermore National Laboratory de Califòrnia. En segon lloc es troba el Red Storm dels Sandia National Laboratories, amb una potència màxima de càlcul per resoldre un sistema d'equacions lineal ($R_{\text{màx}}$) de 101,4 Tflop/s.

En tercera posició se situa BGW instal·lat a l'IBM Thomas J. Watson Research Center amb un $R_{\text{màx}}$ de 91,29 Tflop/s, que ha caigut un lloc, i en quarta, l'ASC Purple d'IBM. En cinquè lloc figura el MareNostrum i en sisè el Thunderbird de Dell que s'ha mantingut a la mateixa posició que a l'edició de juny.

El Tera-10 de Bull, instal·lat al Commissariat a l'Energie Atomique (CEA) de França, s'ha situat en setè lloc, tot i haver augmentat el seu $R_{\text{màx}}$ en 52,84 Tflop/s. A més, Tera-10 ha estat rellevat pel MareNostrum de la primera posició europea, caient alhora dues posicions a la llista.

De la quarta a la vuitena posició s'ha desplaçat el Columbia d'SGI. aquest sistema està instal·lat a l'Ames Research Center de la NASA i compta amb un $R_{\text{màx}}$ de 51,87 Tflop/s. En novè i darrer lloc es troben el supercomputador japonès TSUBAME Grid Cluster i el nord-americà Jaguar, respectivament.

Des de l'última edició de la llista, el nombre de supercomputadors amb processadors Intel ha baixat de 302 a 263, mentre que els processadors AMD continuen creixent, de 80 a 113. A més d'aquests, també destaquen els processadors Power d'IBM amb 91 sistemes i els PA-RISC amb 20.

L' $R_{\text{màx}}$ necessària per poder estar al TOP500 ha passat de 2,03 Tflop/s a 2,73 Tflop/s, mentre que els supercomputadors situats al TOP10 tenen tots un $R_{\text{màx}}$ superior a 54 Tflop/s. Dels fabricants, IBM continua liderant la llista amb 236 sistemes, un 47% del total, seguida de Hewlett-Packard amb 158 i SGI amb 20.

Pel que fa a la distribució geogràfica, els Estats Units continuen encapçalant el TOP500 amb més de la meitat dels sistemes, 322. Europa recupera la segona posició amb 92 supercomputadors i la presència asiàtica baixa de 91 a 79 sistemes.



MareNostrum torna a les primeres posicions del TOP500.

Presentació de PADICAT



D'esquerra a dreta, Lluís Anglada, Marta Contente, Dolors Lamarca, Miquel Huguet i Ciro Lluca.

El 27 d'octubre es va presentar el dipòsit Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) a la Sala Llevant de la Biblioteca de Catalunya (BC). L'acte va comptar amb la presència de la directora de la BC, Dolors Lamarca; la secretària de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament de la Presidència, Marta Contente; el coordinador del projecte PADICAT, Ciro Lluca; el director del

CBUC, Lluís Anglada, i el director del CESCA, Miquel Huguet.

PADICAT és un dipòsit destinat a recollir i preservar tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital. Compta amb un pressupost aproximant de 800.000 euros i pretén implicar, per mitjà d'acords de cooperació, a 300 institucions representatives de la societat civil catalana.

Com ha comentat el coordinador de PADICAT, Ciro Lluca, "l'objectiu del projecte és garantir als ciutadans l'accés permanent a les pàgines web que es realitzen a Catalunya, o sobre Catalunya".

PADICAT recull i preserva tota la producció digital catalana

El dipòsit, que té previst emmagatzemar 10 TB d'informació un cop consolidat el 2009, es troba disponible en tres idiomes, català, castellà i anglès, i permet realitzar cerques per data, tipus de document i domini, entre d'altres. Permet també accedir a l'històric de cada web capturat per veure la seva evolució i ofereix la possibilitat de participar activament proposant webs susceptibles de formar part del Patrimoni Digital de Catalunya.

Tota la informació digital de les eleccions, a PADICAT



A l'apartat d'esdeveniments de PADICAT s'accedeix a l'apartat dedicat a les eleccions catalanes.

Amb motiu de les eleccions al Parlament de Catalunya del passat 1 de novembre, PADICAT ha capturat diversos webs relacionats amb la campanya electoral, com ara www.parlament2006.cat o www.parlament.cat.net, entre d'altres.

Les captures s'han realitzat amb una periodicitat de tres dies per als webs dels partits polítics amb representació parlamentària i d'una setmana per als de la resta de partits que han presentat candidatura i altres portals de notícies i blogs personals relacionats amb les eleccions. Per Lluca "aquesta captura ens permet assegurar, en el futur més immediat, poder accedir a les diferents versions d'aquesta producció digital, essencial per entendre un esdeveniment clau de la societat catalana com han estat aquestes eleccions. És com visitar l'hemeroteca digital dels esdeveniments preelectorals i postelectorals".

Així, PADICAT té disponible una recopilació de totes aquestes captures i ofereix una visió conjunta i completa de tot el procés electoral, el qual ha quedat preservat per a la història. ■

Ampliació de la infraestructura

Durant el mes de novembre s'han realitzat diverses millores en la infraestructura de sistemes i de comunicacions que gestiona el Centre. En concret, l'HP CP4000 (*cadi*) s'ha ampliat amb 17 nodes més, arribant a un total de 33 nodes i 66 processadors (132 nuclis) AMD64 i 528 GB de memòria. Així, ha incrementat el seu R_{punta} en 299,20 Gflop/s.

Aquesta ampliació ajudarà a donar cabuda a un nombre més gran de treballs de fins a 4 processadors, que representen un 66% de treball paral·lel executat al Centre al llarg de 2006. A més, els nous nodes també executaran els treballs de més de 5GB de memòria RAM, un 4% del total dels càlculs realitzats.

Pel que fa al clúster d'e-informació (*ordal*), ha augmentat la seva capacitat a 16 nodes DL360 G4p amb 148 GB de memòria i 1.236 GB en discos Ultra320. Aquests nous nodes s'usaran per reforçar la indexació i captura de webs per al dipòsit PADICAT i per a la creació d'un nou entorn d'allotjament i hostatge de portals i bases de dades universitàries basat en tecnologia de virtualització i el programari Xen. Aquest nou espai de virtualització permet realitzar un tractament individualitzat dels recursos que cada web necessita. A més, i gràcies a aquesta ampliació, també es crearà un entorn de desenvolupament i reproducció dels programaris base dels dipòsits d'e-informació i de les diferents aplicacions internes del Centre.

D'altra banda, s'ha ampliat el grup electrogen de 165 kVA a 450 kVA. Aquest equip s'encarrega de donar corrent al maquinari del CESCO en cas de fallada de la xarxa elèctrica. Està constituït per un motor dièsel d'última generació proveït d'un sistema electrònic de control de la injecció i un dipòsit de combustible de 750 litres que li atorguen una potència màxima en servei d'emergència de 360 kW, dotant al Centre de més fiabilitat i autonomia. ■

Cadi (a dalt) i *ordal* (al centre) durant l'ampliació dels seus nodes.

El nou grup electrogen (a baix) té una capacitat de 450 kVA.



SILVIA SALGADO



Noves tecnologies en CATALÀ!

Els termes *e-lectrònics*

El desenvolupament imparabile de les tecnologies de la informació i la comunicació ha accelerat l'aparició de nous conceptes en sectors d'especialitat tan diversos com la informàtica, el comerç o l'educació entre molts altres. Així, l'anomenada societat de la informació es veu abocada constantment a nous productes, sistemes o mètodes que ens arriben gairebé sempre vehiculats a través de denominacions angleses.

Darrerament, hem après a conviure amb tota una sèrie de termes que tenen com a tret comú la presència d'una lletra *e* seguida d'un guionet i d'un mot anglès. Formes com ara *e-mail*, *e-commerce*, *e-money*, *e-government* o *e-information* són alguns dels molts exemples que ja s'han fet habituals a casa nostra. En anglès aquesta *e*, que correspon a l'abreviació de la forma *electronic*, s'utilitza com a prefix en la formació de termes relacionats amb la comunicació a través de la xarxa Internet.

En català aquest prefix anglès té la seva correspondència en l'adjectiu *electrònic-a*. Així, formes angleses com *e-mail*, *e-cash* o *e-government* ja s'han fixat en català amb les denominacions *adreça electrònica*, *diner electrònic* i *administració electrònica*, respectivament. Al costat d'aquests termes normalitzats, també trobem altres denominacions d'ús molt corrent com *banca electrònica* (per a *e-banking*), *negoci electrònic* (per a *e-business*), *màrqueting electrònic* (per a *e-marketing*), *publicació electrònica* (per a *e-print*), *llibre electrònic* (per a *e-book*) o *informació electrònica* (per a *e-information*). En cadascun d'aquests exemples trobem una denominació descriptiva, entenedora i generada a partir dels recursos de formació propis del català que fa innecessària la incorporació de formacions híbrides com ara **e-comerç*, **e-llibre*, **e-negoci* o **e-informació*.



termcat

centre de terminologia

www.termcat.cat

Estratègies terapèutiques per debilitar l'agent causant de la tuberculosi

***Mycobacterium tuberculosis* és l'agent causant de la tuberculosi, que actualment infecta aproximadament una tercera part de la població i causa més d'un milió de morts cada any. En la fase inicial de la infecció, la producció d'òxid nítric (NO) generada a través de l'activació de macròfags contribueix als mecanismes de defensa del cos humà davant el microorganisme. No obstant això, la infecció sol romandre en estat de latència com a resultat d'un balanç dinàmic entre el creixement del microorganisme i la resposta immunitària, suggerint l'existència de mecanismes de resistència en el microorganisme davant a l'NO.**

Per aquest motiu, com explica el professor de la UB Francisco Javier Luque, “la possibilitat de poder definir estratègies terapèutiques que debilitin aquest mecanisme de resistència seria d'un interès indubtable per contribuir a l'eliminació del bacil. La resistència davant a l'NO sembla estar associada a l'activitat dioxigenasa de l'hemoglobina truncada N (trHbN), que és capaç de transformar NO en anió nítrat, que és totalment inert”.

“Conèixer com trHbN porta a terme aquesta transformació química és, doncs, fonamental”, afegix Modesto Orozco, professor de la UB. “Per a això, és necessari identificar la relació existent entre l'estructura química de la proteïna i el seu paper en la funció biològica que realitza”. Aparentment, l'establiment d'aquesta relació hauria d'estar facilitada pel fet que trHbN pertany a la superfamília de l'hemoglobina, i que està àmpliament distribuïda. Malgrat això, existeixen una sèrie de diferències estructurals molt marcades entre trHbN i hemoglobina. Des d'un punt de vista funcional, la diferència més rellevant és que trHbN, malgrat la seva petita grandària, té delineat en el seu interior un canal apolar que connecta la cavitat del grup hemo amb la superfície de la proteïna, mentre que en l'hemoglobina apareix reemplaçat per una sèrie de cavitats capaces d'acomodar temporalment lligands diatòmics.

Se sap que la conversió d'NO a anió nítrat per part de la forma oxigenada de trHbN té lloc a una major velocitat que la pròpia unió d'O₂ a la forma deoxigenada de la proteïna. Això, doncs, indica que la difusió del lligand a la cavitat d'unió del

Luque: “Definir estratègies terapèutiques que debilitin el mecanisme de resistència del bacil *Mycobacterium tuberculosis* seria d'un interès indubtable per contribuir a la seva eliminació”

grup hemo constitueix l'etapa limitant dintre del procés catalític. Per aquest motiu, es pot creure que la presència d'un túnel clarament delimitat a l'interior de trHbN té un paper funcional rellevant en l'activitat de la proteïna. La caracterització del paper funcional d'aquest túnel i del mecanisme molecular que regula la migració de lligands ha estat l'objectiu del treball de recerca dut a terme pel grup de la UB en col·laboració amb Darío Estrín i Marcelo Martí, de la Universitat de Buenos Aires (Argentina).

Metodologia

La verificació del paper funcional desenvolupat pel canal de difusió del lligand i el mecanisme molecular que subjeu en el seu funcionament, així com la contribució específica exercida per determinats residus, tant en el canal de difusió de lligands com en el centre d'unió del grup hemo, s'han examinat fent servir tota una sèrie de tècniques computacionals. En particular, però, cal destacar càlculs híbrids de mecànica quàntica/mecànica molecular (QM/MM), que han estat realitzats amb el programa SIESTA fent servir els recursos computacionals del CESCA. Aquests càlculs han permès identificar la contribució de residus com TyrB10 i GlnE11 en la modulació de l'afinitat de trHbN per O₂, així com determinar la influència de la proteïna sobre les diverses etapes de la reacció química associada a la conversió d'NO en anió nítrat.

D'altra banda, ha estat necessari realitzar extenses simulacions de dinàmica molecular, que s'han dut a terme fent servir el programa AMBER, donant lloc a la generació de trajectòries corresponents aproximadament a 650 ns. Aquestes simulacions inclouen les formes deoxigenada i oxigenada de la proteïna nadiua, així com dels mutants TyrB10_Phe i GlnE11_Ala, i han permès caracteritzar les preferències estructurals locals de residus clau de la proteïna, així com identificar el seu comportament dinàmic. La realització de simulacions tan llargues per a aquest sistema no hauria estat possible sense l'accés als recursos del Mare Nostrum, del BSC.

Resultats

En concordança amb les dades experimentals, l'anàlisi dels resultats ha permès confirmar que el procés de conversió d'NO en anió nítrat és energèticament favorable, tot i que l'entorn de la proteïna no sembla jugar un paper clau en el perfil energètic d'aquesta transformació química. Aquest resultat, d'altra banda, dona més rellevància al fet que l'activitat dioxigenasa de trHbN sembla estar lligada a la seva capacitat per regular l'accés d'NO. En aquest sentit, tal com indica Axel Bidon-Chanal, investigador de la UB, “el resultat més rellevant del nostre treball és que ha permès postular un mecanisme de regulació dinàmica induït pel lli-

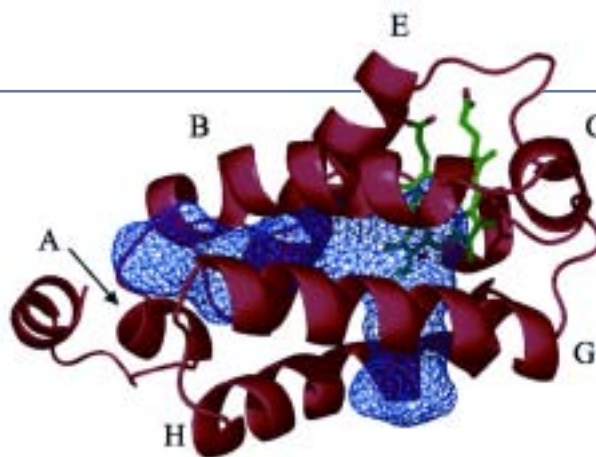
gand, que explota les característiques estructurals del canal de difusió del lligand existent en trHbN”.

L'estructura cristal·logràfica ha revelat l'existència d'un túnel constituït per dos canals perpendiculars entre ells, aproximadament de 8 i 20 Å de longitud per al canal secundari i principal, respectivament. En el cas de trHbN deoxigenada, el canal principal és inaccessible degut a l'orientació de la cadena lateral de PheE15, que ocupa l'espai interior d'aquest canal. Per això, l'accés d'O₂ es produeix a través del canal secundari. No obstant això, en la proteïna oxigenada, el residu PheE15 adopta dues conformacions principals. L'una correspon a l'orientació descrita per a l'estadi desoxigenat. L'altra, on la cadena lateral de PheE15 està disposada de forma paral·lela a l'eix del canal principal, possibilita la difusió de petits lligands com NO.

Com explica Axel Bidon-Chanal, “la qüestió clau és, doncs, comprendre quin mecanisme molecular regula aquest tret diferencial en l'accessibilitat a través de l'eix principal del canal en els estats desoxigenat i oxigenat de trHbN, tot tenint present que aparentment l'única diferència rau en la presència d'O₂ lligat al grup hemo”.

El mecanisme de control per a l'obertura de PheE15, que actua com a porta d'accés a través del canal principal, sembla ser aparentment d'una gran senzillesa. Bàsicament, està format pels residus TyrB10 i GlnE11, que actuen com a interruptor molecular activat per la unió d'O₂ al grup hemo. Així, aquesta unió té un doble efecte. D'una banda, altera el patró de pont d'hidrogen entre TyrB10 i GlnE11, provocant que GlnE11 adopti una sèrie de conformacions plegades, que a la ve-

Figura 1. Representació de l'esquelet peptídic de l'hemoglobina truncada N (trHbN).



gada tenen com a resultat un increment en la pressió mecànica exercida per GlnE11 sobre l'anell de benzè de PheE15.

D'altra banda, aquest canvi altera la dinàmica global de l'esquelet peptídic de la proteïna, de forma que s'afavoreix el desplaçament relatiu de les hèlices B i E, que defineixen el canal principal, mentre que a la forma desoxigenada de l'enzim les principals fluctuacions de l'esquelet peptídic afecten elements estructurals totalment diferents. En conjunt, la combinació d'un efecte 'local', associat a una major compressió mecànica de GlnE11 sobre PheE15, i un efecte 'global', lligat a l'alteració en la naturalesa de les fluctuacions dinàmiques globals de l'esquelet peptídic, condueix a l'obertura del canal principal.

Aquests estudis suggereixen que el parell de residus TyrB10 i GlnE11 són crítics per a la viabilitat funcional de l'enzim a conseqüència de tres factors. En primer lloc, modulen l'afinitat de l'enzim per O₂. En segon lloc, faciliten el posicionament correcte d'NO en la cavitat de l'hemo lligat a O₂. Finalment, constitueixen el mecanisme d'obertura del canal principal de l'enzim, que hauria de permetre l'accés d'NO únicament quan el grup hemo està

ocupat per O₂. Aquest mecanisme es beneficiaria del marcat caràcter hidrofòbic del canal principal, que actuaria com a reservori per concentrar lligands diatòmics, i al mateix temps limitant l'accessibilitat de molècules d'aigua a la cavitat. Sembla raonable, doncs, considerar que aquest mecanisme ha estat seleccionat per assegurar l'accés d'NO al grup hemo únicament en aquelles condicions en les quals la proteïna pot portar a terme la seva funció dioxigenasa, i per tant, mantenir la integritat del mecanisme de defensa contra NO, que és vital per la supervivència del microorganisme.

Tot i que aquest mecanisme ofereix una explicació a les dades experimentals disponibles, obre noves incògnites. D'una banda, perquè el sistema de defensa del bacil sigui plenament eficaç cal assegurar que l'aníon nitrat format a l'interior del centre actiu pugui ser alliberat fàcilment al medi exterior. Això sembla difícil a causa del marcat caràcter hidrofòbic de les dues branques del canal de difusió de lligands, i cal preguntar-se si la presència de l'aníon nitrat pot donar lloc a l'obertura de noves vies de sortida. Una altra qüestió rellevant és el mecanisme pel qual la proteïna pot recuperar l'estat d'oxidació de l'àtom de ferro en el grup hemo.

Des d'un punt de vista evolutiu, és interessant esbrinar si proteïnes estretament relacionades amb trHbN poden estar associades a funcions similars en altres microorganismes. Finalment, no cal oblidar les implicacions d'aquests resultats per al disseny d'estratègies que puguin afeblir el sistema de defensa de *Micobacterium tuberculosis*. El coneixement del mecanisme molecular que regula l'accés de lligands hauria de facilitar la identificació de possibles vies per reduir la capacitat del bacil per romandre en estat de latència. ■

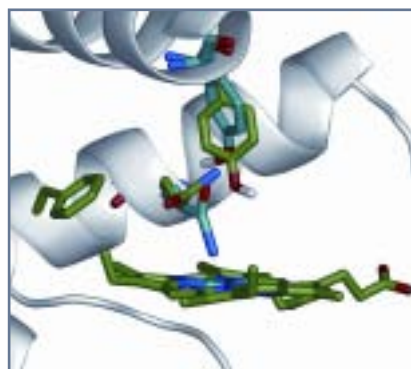
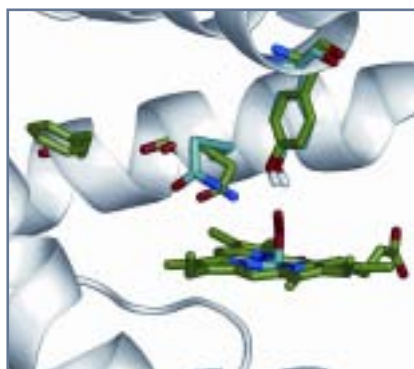


Figura 2. Interaccions entre TyrB10 i GlnE11 en el centre actiu de trHbN en la forma desoxigenada (dreta) com oxigenada (esquerra).

La popularitat del tractament de residus sòlids urbans al TDX



Una de les solucions emprades en la gestió dels residus sòlids urbans és la valorització energètica. És a dir, la incineració amb recuperació d'energia. Ara bé, és important controlar de forma adequada aquest procés d'incineració dels residus per evitar, en la mesura en que sigui possible, alliberar substàncies contaminants a l'atmosfera que puguin ocasionar problemes de contaminació industrial. Aconseguir-ho és el propòsit de la tesi doctoral *Estudio de la aplicación de sistemas basados en el conocimiento a la operación de una planta de tratamiento de residuos urbanos por valorización energética*, escrita per Xavier Llauro i dirigida per Manel Poch del Departament d'Enginyeria Química, Agrària i Tecnologia Agroalimentària de la Universitat de Girona (UdG).

Aquesta tesi, que va ser llegida el 1999 i introduïda al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) el 2003, és la més consultada de la Universitat de Girona i la dinovena més consultada del pas-

sat curs acadèmic 2005-06 d'entre totes les tesis del servidor. Com explica la rectora de la UdG, Anna M. Geli, "aquesta tesi s'emmarca en una preocupació pel medi ambient, una de les línies estratègiques

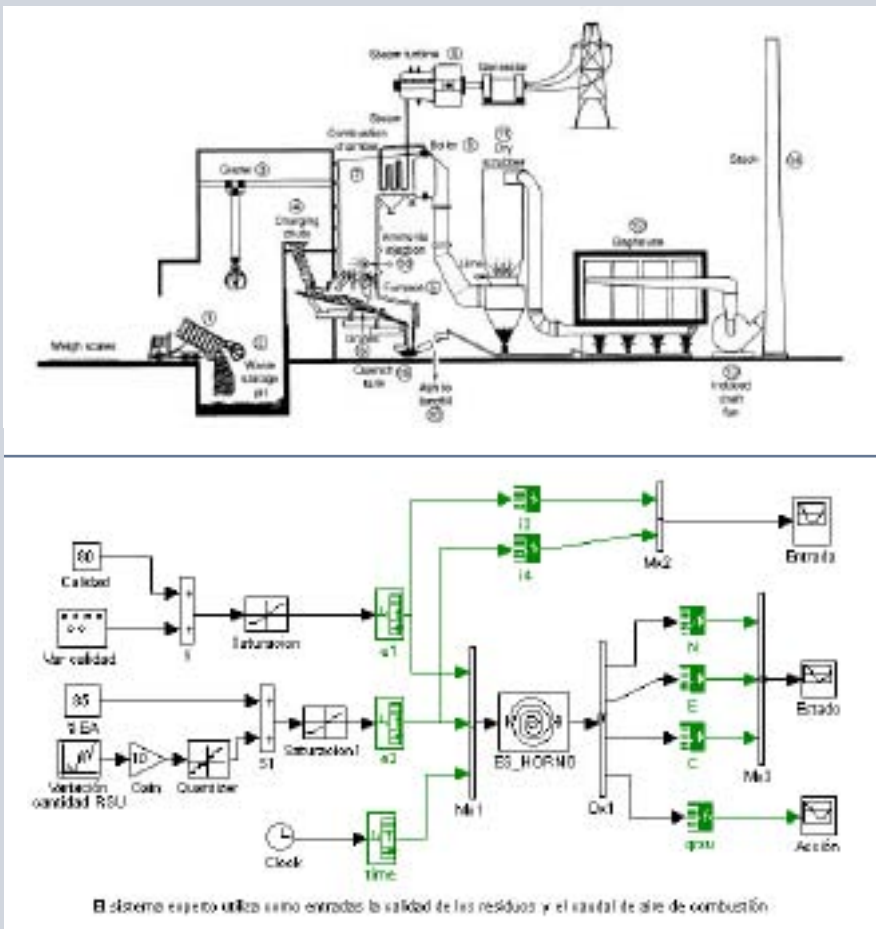
de la nostra universitat, que es postula com a institució que vol ajudar a tenir un món més sostenible".

Per al director i l'autor de la tesi, "com a investigadors que intentem aplicar les millors tecnologies a la gestió de processos, i creiem en elles, pensem que el TDX és un servei molt eficient, per tal com entenem que es tracta també de poder aplicar les noves tecnologies perquè el treball dels investigadors sigui més fàcil, més còmode i més eficient, que és el mateix que nosaltres hem procurat a la tesi".

L'objectiu de la tesi és contribuir a resoldre un problema real, com és la gestió dels forns de combustió emprats en les plantes de tractament de residus sòlids urbans per valorització energètica, mitjançant el desenvolupament d'una eina novedosa, com són els sistemes basats en el coneixement. Com explica l'autor, "els forns utilitzats en els processos d'incineració d'aquestes plantes de tractament són molt complexos de gestionar perquè processen un material variat, com són els residus sòlids urbans. La climatologia, el consum dels ciutadans o el recorregut del camió de recollida són variables que modifiquen la composició d'aquests residus i per tractar-los és necessària l'aplicació de sistemes basats en el coneixement".

Segons Llauro, "el gran nombre de consultes que ha rebut la tesi pot ser degut a l'interès a com abordar una millor gestió d'aquests processos en general, i específicament pot ser interessant per a investigadors que es plantegen la problemàtica ambiental des d'una perspectiva innovadora. D'altra banda, els professionals que treballen en el control i gestió de processos complexos poden obtenir una aproximació aplicada a un problema real de gestió ambiental del qual no existeixen models prou desenvolupats previs que permetin un control automàtic".

Aconseguir que tant el procés d'incineració com el tractament dels gasos de les plantes d'incineració de residus es realitzi en condicions òptimes pressuposa tenir un bon coneixement de les dependències entre les variables del procés. Són necessaris mètodes adequats de mesura de les variables més importants i tractar els valors obtinguts amb models ajustats que permetin configurar-los com a magnituds d'ordre. Segons Llauro, "un model clàssic sembla poc útil en aquest



Funcionament de la incineradora (imatge superior) i estructura del sistema expert (imatge inferior).

cas, a conseqüència de la complexitat dels processos, la manca de descripció quantitativa i la necessitat de realitzar els càlculs en temps real". Per tant, és necessari emprar tècniques de processament de dades i mètodes informàtics com ara tècniques de simulació, models matemàtics o sistemes basats en el coneixement.

De forma més concreta, la tesi pretén aplicar un mètode d'adquisició de coneixement per al control de sistemes complexos inspirat en el comportament humà. Com explica Poch, "les persones que treballen a les incineradores han anat adquirint experiència amb el temps i són capaces d'identificar les operacions de treball a partir de la seva expertesa". És a dir, aplicant procediments de prova i error, reforç d'hipòtesis, etc., es va adquirint i refinant el coneixement, i elaborant un model mental.

Per tant, "podem desenvolupar un model anàleg que pugui ésser implementat en un sistema informàtic, mitjançant tècniques d'intel·ligència artificial", comenta Llauro. A més, Poch afegeix que "aquests sistemes basats en el coneixement permeten la integració d'observadors qualitius i petits mòduls de coneixement especialistes (sistemes experts), de forma que el model qualitatiu avalua en quina situació es troba el sistema dinàmic i el sistema expert proposa una acció a l'operador".

En aquest marc, la tesi va un pas més enllà desenvolupant una aplicació en un cas real, emprant els senyals proporcionats per la planta incineradora de Girona i incorporant-hi criteris qualitius específics. Segons Poch, "no només és una aproximació teòrica a un problema ambiental, on no hi havia treballs previs d'aplicació d'aquest tipus, sinó que és un sistema que es construeix a partir de les dades de funcionament de la planta en concret".

Específicament, la transmissió de calor a l'interior del forn d'incineració RSU (residus sòlids urbans) té lloc entre una barreja de gasos i les parets d'aquest. El càlcul d'aquesta transmissió de calor exigeix conèixer la composició del gas, les seves propietats i la distribució de temperatures en el forn i a les parets. "El problema és de gran complexitat i només es pot abordar aplicant certes simplificacions. A partir d'aquestes s'ha pogut desenvolupar un model qualitatiu que representa de forma prou satisfactòria el comportament del procés, de manera que

pot ser emprat en l'etapa de control intel·ligent", comenta Llauro.

Per a l'adquisició del coneixement s'han establert diferents nivells. En primer lloc, hi ha el d'interfície amb el procés en què es treballa amb informació numèrica procedent de la instal·lació. A

Es pot constituir un sistema expert que mantingui constant la temperatura del forn actuant sobre els residus que l'alimenten

continuació s'estableix un nivell intermedi, en el qual es tracten les relacions causals entre les variables i on es pot treballar amb informació numèrica i qualitativa. Finalment, en el nivell superior es troben les regles que descriuen el coneixement, raonant al voltant dels fets. D'aquesta manera es pot constituir un sistema expert que mantingui constant la temperatura del forn actuant sobre els residus que l'alimenten.

La gestió de residus, per a Poch, "és un tema complex en el qual intervien diferents components, alguns d'ells numèrics i susceptibles de ser determinats mitjançant anàlisis, però també d'altres que són qualitius i que poden fer referència a l'experiència en la gestió dels processos adquirida per les persones o, fins i tot, a percepcions socials al voltant del tema".

En aquest marc és important disposar d'eines que vagin més enllà del control tradicional de processos que requereix un coneixement acurat de les relacions entre les diferents variables i procediments quantificats de monitorització. "El nostre treball ajuda a obrir una porta a una nova visió d'aquesta gestió, que necessàriament ha de ser més integrada que la feta fins ara", comenta Llauro. "A més, s'ha de tenir en compte que aquesta problemàtica no afecta únicament el sector residus, sinó que és extensible a qualsevol problemàtica complexa", afegeix Poch. Aquest fet, ha motivat que el grup de treball en què es va realitzar la tesi hagi desenvolupat sistemes basats en el coneixement aplicats a la gestió d'Estacions Depuradores d'Aigües Residuals (EDAR) que actualment estan sent utilitzats a diferents EDAR del país. ■



Manel Poch. És catedràtic d'Enginyeria Química a la Universitat de Girona (UdG). Va obtenir la llicenciatura en Química Industrial i el doctorat en Ciències a la Universitat Autònoma de Barcelona on va exercir de professor ajudant i titular d'universitat. S'ha especialitzat en l'estudi i propostes de millora de processos ambientals, especialment en tractament d'aigües residuals. Ha publicat 80 articles referenciats al Science Citation Index (SCI), ha escrit el llibre de divulgació *Les qualitats de l'aigua* i ha dirigit 15 tesis doctorals. Imparteix docència d'enginyeria química i ambiental de les titulacions de Química i Ciències Ambientals, així com matèries de la seva especialitat en els màsters de Medi Ambient i Ciència i Tecnologia de l'Aigua de la UdG. Actualment és director del Laboratori d'Enginyeria Química i Ambiental (LEQUIA), reconegut com a grup de recerca consolidat per la Generalitat de Catalunya i membre de la xarxa de centres de suport a la innovació tecnològica del CIDEM.



Xavier Llauro. És enginyer industrial per la Universitat Politècnica de Catalunya (1974) i doctor en Enginyeria Industrial per la Universitat de Girona (1999). És professor associat d'aquesta universitat des de 1994, on dona classes de termodinàmica i control de processos. Les seves àrees d'interès són la modelització i control de sistemes, utilitzant sistemes basats en el coneixement. També treballa en aplicacions de la teoria del caos determinista a l'enginyeria. En l'àmbit professional ha treballat amb diverses empreses d'enginyeria en projectes d'àmbit energètic i de la indústria paperera.

Noves connexions i ampliacions a l'Anella

La Biblioteca de l'Abadia de Montserrat s'ha connectat a l'Anella mitjançant una línia ADSL a 4 Mbps. Aquesta institució, que hi estava adherida fins a fer efectiva la seva connexió, té com a missió donar suport a la lectura i a la recerca pròpies d'un monestir benedictí. És un instrument indispensable per recolzar els centres d'estudi de l'Abadia i l'activitat cultural de Montserrat.

El 17 de novembre, l'Escola Universitària Politècnica de Mataró (EUPMT) de la Universitat Politècnica de Catalunya ha ampliat el seu punt d'accés a l'Anella de 10 a 100 Mbps i l'Institut Químic de Sarrià (IQS) de la Universitat Ramon Llull, de 10 a 20 Mbps.

El Centre UNESCO de Catalunya també ha ampliat la seva connexió amb una línia ADSL a 4 Mbps. Fins al 27 d'octubre, aquest centre es connectava a través d'una línia punt a punt de 384 Kbps. El Centre UNESCO té com a objectiu difondre els

ideals, documents i activitats de la UNESCO en els àmbits educatiu, del patrimoni, d'accés al coneixement i de sostenibilitat ambiental; i fomentar la cultura de la pau, l'educació en valors i en els drets humans, la diversitat cultural i lingüística, i el diàleg interreligiós.

D'altra banda, s'ha connectat a l'Anella un segon centre de treball de recerca, situat a Valls, del Departament de Nutrició Animal de l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA). Aquest centre es connecta des del 28 de setembre a través d'una línia ADSL a 2 Mbps.

El Departament Nutrició Animal es dedica a l'avaluació nutricional de primeres matèries, a la caracterització dels efectes de la dieta i dels additius nutricionals sobre la producció animal i llurs productes finals, a la digestibilitat dels aminoàcids en porcs, i a la recerca de productes alternatius als antibiòtics i als promotors de creixement, entre d'altres. ■

Nova col·lecció de la UAB a RECERCAT

El Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) compta amb una nova col·lecció de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) que contindrà els projectes i treballs de final de carrera d'Enginyeria Química de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria.

El primer document incorporat al dipòsit porta per títol *Planta de producció de carbonato sòdic* i presenta el procés de producció del carbonat sòdic a partir del mètode Solvay. Amb aquesta darrera, la UAB disposa de 9 col·leccions a al dipòsit RECERCAT. ■

200 tesis de la UdG, 1.400 de la UAB i 100 de la UdL al TDX

A mitjan novembre, la Universitat de Lleida (UdL) va introduir la seva tesi número 100 al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). Es tracta de la tesi de Montserrat Llovera amb el títol *Aplicació de l'espectrometria de masses a l'anàlisi cromatogràfica de patulina en suc de poma*. El director de la tesi ha estat Ramon Canela del Departament de Química de la UdL.

La tesi presenta diferents estratègies encaminades a millorar l'anàlisi qualitativa de la patulina, una micotoxina produïda per diversos fongs presents en aliments vegetals i animals, en el suc de poma mitjançant la utilització de tècniques cromatogràfiques d'acoblament CG-EM i HPLC-EM.

També, la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) va afegir-hi, el nou de novembre, la seva tesi número 1.400. *Caracterització de l'entorn genètic de la Betalactamasa CTX-M-9* és el títol de la tesi d'Aurora García, que ha estat dirigida per Ferran Navarro del Departament de Genètica i Microbiologia de la UAB.

La tesi tracta de l'anàlisi de nou mostres d'aigües residuals, tant humanes com animals, amb el propòsit de determinar els bacteriòfags presents en elles com a possibles vehiculadors de gens de resistència a betalactàmics.

A més, a l'octubre, la Universitat de Girona (UdG) va incorporar la seva tesi número 200 al TDX. La tesi porta per títol *Bienestar i acolliment d'infants en família extensa: percepcions, avaluacions i aspiracions dels principals agents implicats* i ha estat escrita per Carme Montserrat i dirigida per Ferran Casas del Departament de Psicologia de la UdG.

L'objectiu general d'aquesta tesi ha estat estudiar els acolliments en família extensa dins del sistema de protecció infantil a Catalunya que s'ha realitzat recollint els punts de vista dels tres grans conjunts d'agents socials implicats: els acollidors, els infants i adolescents acollits i els professionals dels Equips d'Atenció a la Infància i Adolescència (EAIA) que els atenen. Així mateix, l'estudi s'ha dut a ter-

me amb una metodologia de disseny mixt, recollint dades quantitatives i qualitatives que han permès analitzar la qualitat de vida dels nois i noies, i dels seus acollidors.

TDX, nou idioma i rècord de consultes

El servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) ja està disponible en gallec. A www.tesisenred.net/ga es pot accedir al servidor que ha estat traduït al gallec gràcies a la col·laboració de la Universidade da Coruña. Amb aquesta mesura es vol potenciar la participació d'universitats de la resta de l'Estat, com ja ho han fet les de la Corunya, Múrcia o Cantàbria.

D'altra banda, el mes d'octubre es va superar el rècord de consultes mensuals rebudes al servidor, 370.091, sobrepassant l'anterior del mes de maig de 344.176 consultes. A més, el dipòsit ha rebut enguany més de 3.000.000 de consultes, un milió més que el 2005.

Finalment, el TDX disposa des d'octubre d'un camp de cerca per any de defensa de la tesi, que permet fer cerques de tesis des de l'any 2000 fins a l'actualitat o d'anteriors al 2000. D'aquesta manera es pot acotar la cerca, situant-se abans o després de l'últim decenni. ■

Setmana de la Ciència

Enguany s'ha celebrat l'onzena edició de la Setmana de la Ciència, una iniciativa que té l'objectiu d'apropar la ciència i la tecnologia a la societat. Com ja és habitual, el CESCA hi ha participat oferint visites guiades a les seves instal·lacions, que han inclòs un passeig pel Museu Tecnològic de Supercomputació, una visita a la sala de màquines, que acull el maquinari de supercomputació i de comunicació d'altres prestacions, i una breu xerrada sobre les activitats que realitza el Centre. En total s'han rebut 127 visitants, que han pogut observar les tecnologies avançades de comunicacions, els supercomputadors i els projectes de recerca científica que s'hi estan duent a terme actualment. ■



El grup SETI@home-Catalunya va visitar les instal·lacions del CESCA.

La revista *Lauro*, a RACO gràcies als ajuts de digitalització

Lauro ha estat la primera publicació que s'ha incorporat a RACO fruit dels ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes que es van engegar el passat mes de març i que comptaven amb 20.000 euros patrocinats pel llavors Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació.

En total s'han digitalitzat 26 exemplars de *Lauro*, unes 2.324 pàgines que conformen al voltant de 300 articles, per mitjà de l'empresa ArtyPlan, que va resultar escollida per realitzar aquesta tasca després de passar amb èxit una prova pilot de digitalització de la revista *Publicacions matemàtiques* de la UAB i complir amb els estàndards de digitalització proposats pel CBUC.

Lauro va néixer el 1990 amb el propòsit d'obrir portes i projectar els afanys del Museu de Granollers al més ampli sector possible, difonent les seves activitats i estudis sobre el patrimoni natural i cultural de la comarca del Vallès Oriental.

A més de *Lauro*, 14 publicacions pertanyents a la Universitat de Barcelona, a l'Autònoma de Barcelona, a la Pompeu Fabra, a la de Girona, a la de Lleida, a la de Vic, al Centre d'Investigacions de Relacions Internacionals i Desenvolupament (CIDOB), a l'Associació de Sociolingüistes de Llengua Catalana (ASOLC) i al Centre de Promoció de la Cultura Popular i

Tradicional Catalana (CPCPTC), a les quals també se'ls hi va concedir l'ajut, estaran també digitalitzades i disponibles a RACO a final d'any.

Dues revistes més de l'IEC a RACO

El dipòsit de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) compta, des del 2 d'octubre, amb dues revistes més de l'Institut d'Estudis Catalans (IEC) que ja porta 34 publicacions introduïdes. Es tracta de *Treballs de Física* i *Sessió Conjunta d'Entomologia*. La primera és una compilació d'articles sobre ciències físiques i la segona és un recull de comunicacions que tracten sobre aspectes faunístics, taxonòmics, ecològics, d'aplicació agrària i mèdics, entre d'altres. Amb aquestes darreres incorporacions RACO disposa de 107 revistes en accés obert. ■

Acord de col·laboració entre el CTC i el CESCA

El Consorci de Transferència de Coneixement (CTC) ha establert un acord de col·laboració amb el CESCA per tal de poder disposar dels serveis que ofereix el Centre.

Segons Jordi Rojas, director del CTC, "per al nostre Consorci, confiar aquest conjunt de serveis al CESCA és coherent amb les seves funcions i activitats en el sistema d'R+D+i català". El CTC és un organisme creat a iniciativa del Govern de la Generalitat de Catalunya i té com a missió "promoure la transformació del coneixement generat a les universitats i centres de recerca en valor social i econòmic, així com fomentar la col·laboració entre tots els agents que intervenen en aquest

procés", afegeix Rojas.

En aquest sentit, una de les aplicacions que es gestionaran en el marc d'aquest acord és l'INTEUM, un programari de gestió de la propietat intel·lectual que engloba la totalitat de les fases d'aquest procés. S'estructura en mòduls (registre, protecció i comercialització) i conté altres aplicacions relacionades amb la gestió de patents.

Així, INTEUM esdevé una eina útil perquè la recerca produïda a les universitats pugui trobar una aplicació en el món industrial, ja que disposa d'un entorn que permet als investigadors incorporar les seves patents al sistema des d'on els agents de la propietat intel·lectual poden

gestionar-les d'una manera homogènia i precisa. A més, "es tracta d'una experiència sense precedents a l'Estat, perquè es concep com una plataforma de treball cooperatiu que permet, alhora, la gestió tècnica, administrativa i comptable, i l'exploració comercial", explica Rojas.

De moment, les universitats que disposen d'aquest programari són la UAB, la UB, la UPC, la UPF, la UdL i la URV fruit del Plan de Acción Coordinado del Ministerio de Educación y Ciencia. Amb cadascuna d'aquestes universitats, el CTC ha signat un acord per gestionar de forma coordinada l'INTEUM i elaborar una base de dades que constitueixi una cartera unificada d'oferta de tecnologies i capacitats generada per les universitats que estarà disponible al web del CTC. ■

Retransmissió en directe de televisió d'alta definició sobre IP

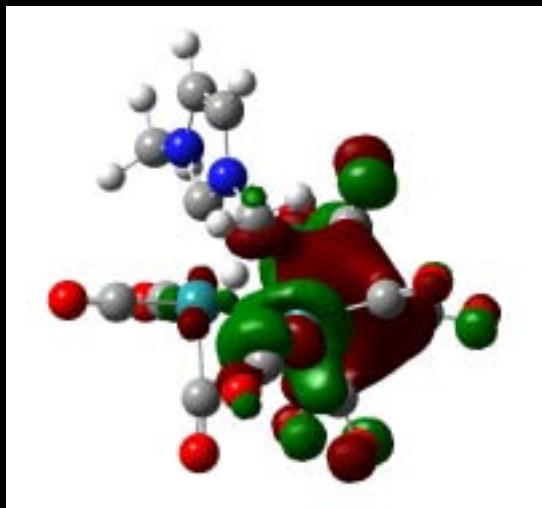
El passat 29 de setembre es va dur a terme una retransmissió en directe sobre una plataforma experimental de televisió d'alta definició sobre IP. En commemoració del desè aniversari de la companyia de dansa contemporània i clàssica coreana Nulhui, es va retransmetre en directe l'obra *I do not know* des de l'LG Art Center (Seül) cap al Communications Research Centre, a Ottawa (Canadà), i al Mercat de les Flors, a Barcelona. Aquesta plataforma, concebuda com un escenari de

creació artística global i distribuïda, està essent desenvolupada conjuntament per l'ANF de Corea, la Fundació i2CAT i diverses universitats dels EUA i Canadà, i ha estat posada a prova per primera vegada per a la comunitat de les Arts en Moviment. La retransmissió s'ha dut a terme amb la col·laboració de les xarxes de recerca coreana (KREONet2), canadenc (CANet*4), europea (GEANT2), espanyola (REDIRIS) i catalana (Anella Científica), i ha usat un cabal de prop d'1 Gbps. ■

F O T O / N O T Í C I A

L'activitat investigadora de preparació i reactivitat de complexos que contenen lligands carbens N-heterocíclics (CNH) ha estat molt intensa des dels anys noranta, ja que molts d'aquests complexos són excel·lents catalitzadors per a la síntesi de compostos orgànics d'interès. Per exemple, complexos que contenen CNH catalitzen eficientment reaccions com ara acoblaments de Heck, Suzuki, Sonogashira, Stille i Kumada, arilació d'amines, amidació d'arils, metàtesi d'olefines, hidrogenació, hidrosililació, hidroformilació, acoblament d'alquins, síntesi de furans i arilació i alquienilació d'aldehids. No obstant això, resulta curiós que la química de coordinació i catàlisi publicades fins ara amb lligands CNH ha estat duta a terme amb complexos mono i binuclears, tot i que molt majoritàriament mononuclears. No s'ha publicat cap complex trinucler, ni de nuclearitat superior a tres, amb un lligand CNH.

Aquest projecte neix de la col·laboració de Javier Cabeza, de l'Instituto Enrique Moles; Santiago García Granda i Enrique Pérez Carreño, del Grupo de Rayos X de la Universidad de Oviedo; i Joan Piniella, de la Unitat de Cristal·lografia de la UAB. Els



objectius d'aquesta recerca són estudiar la incorporació d'un o varis carbens N-heterocíclics a clústers carbonílics trinuclears de ruteni i osmi; la reactivitat d'aquests clústers amb altres lligands, sobretot molècules orgàniques insaturades; la reactivitat de lligands coordinats, bé siguin els mateixos carbens o altres lligands insaturats i, finalment, l'activitat catalítica d'alguns d'aquests compostos en reaccions d'hidrogenació i de polimerització per metàtesi de substrats orgànics insaturats. Els estudis de síntesi i reactivitat estaran acompanyats d'una important quantitat d'estudis estructurals, així com d'estudis teòrics (càlculs DFT), que ajudaran a racionalitzar els resultats experimentals. ■

Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA



Patrocina



Generalitat de Catalunya



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
CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINACIÓ

Carme Monserrat

REDACCIÓ

Teresa Via

Sílvia Salgado

COL-LABORACIÓ

Glòria Fontova (TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà-Associats.com

IMATGE DE LA PORTADA

Grup d'enginyeria molecular

i disseny de fàrmacs

Dept. de Química Física (UB)

Dept. d'Enginyeria Química (UPC)

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

