

# CrossFire<sub>plus</sub>Reactions, un database per la ricerca chimica italiana

**Gianpiero Limongiello**

*CILEA, Segrate*

## *Abstract*

*In quest'articolo è descritto il nuovo database di prodotti, reazioni chimiche e citazioni, presto disponibile al CILEA per tutti i chimici italiani dell'ambiente della ricerca. CrossFire<sub>plus</sub> Reactions del Beilstein Informationssysteme GmbH sarà installato, entro poche settimane, su un elaboratore del CILEA dedicato completamente a questo nuovo servizio. Tutti gli aderenti al Consorzio Italiano CrossFire, riservato alle Università e agli Enti di ricerca italiani, avranno a disposizione sui propri PC **Beilstein Commander**, il programma d'interrogazione e ricerca del database.*

Se l'Informatica con i suoi costi e misteri deve servire a qualcosa, che almeno il continuo aggiornamento di software e hardware macchine, sempre spacciato dai responsabili come "assolutamente indispensabile" e "non più dilazionabile", ci liberi dalla fatica, dai mal di schiena e dalla polvere nel naso delle ricerche bibliografiche. Anche perché spesso viene chiesto in cambio, ai comuni mortali, la sofferenza pura di imparare nuovi comandi, nuove regole e nuovi *click* dei mouse, con quello che noi informatici chiamiamo, con un po' di sadismo, "semplice buon senso"<sup>1</sup>.

Passare con un semplice cambio di sedia e tocco di mouse, dalla biblioteca di Facoltà a quello che è forse il più completo database di prodotti e reazioni chimiche oggi disponibile, non è certo cosa da poco. Bene, allora che ne dite di non dover andare fisicamente in biblioteca, ma di farlo dallo stesso PC su cui state scrivendo il "paper" da pubblicare, per il quale il riferimento a quella disgraziata molecola proprio non vi viene in mente? Se foste già soddisfatti così, e probabilmente molti lo sarebbero, deludereste però tutti quei programmatori e progettisti

software che hanno fatto una fatica del diavolo per regalarvi un altro gadget (ammesso che abbiate il coraggio di chiamarlo così): la ricerca in modalità grafica. Basta solo disegnare sullo schermo del vostro PC la trasformazione chimica che vi serve o anche solo parte di questa e CrossFire<sub>plus</sub>Reactions, cercando in un database di oltre sei milioni<sup>2</sup> di reazioni, vecchio al massimo di tre mesi, v'indicherà in che condizioni effettuarla, le sue caratteristiche e tutti i riferimenti bibliografici presenti in letteratura, raggiungibili in maniera ipertestuale (per capirci, con un banale *click* sui riferimenti delle citazioni trovate); facile, no?

Il CILEA fornirà a breve l'accesso a CrossFire<sub>plus</sub>Reactions, un prodotto del *Beilstein Informationssysteme GmbH* con tutte queste caratteristiche, e forse anche qualcuna di più. L'accesso, come forse è intuibile dalle premesse, non sarà né libero né gratuito, ma riservato a tutti gli enti italiani di ricerca chimica che aderiscano al neocostituito Consorzio Italiano CrossFire (CIC nel seguito), sostenendone i costi, così come indicato nel seguito dell'articolo.

## **Il Produttore**

*Beilstein Informationssysteme GmbH* (<http://www.beilstein.com>) si occupa di gestire informazioni di ambito chimico, quindi

<sup>1</sup> "...certo, *rm* sta per remove, cioè come *erase* o *del* sotto DOS, già, *delete* in VMS, sì sì *click* pulsante destro poi scegli *taglia* o *elimina*, ah no è in Inglese, beh è *cut*, no no, fai l'*undo* (pronuncia "failandù")..."

<sup>2</sup> Dieci milioni entro il 1998.

essenzialmente database e programmi correlati. Tra questi vi è appunto CrossFire, di fatto la versione informatica del "Beilstein", arricchito da una costellazione di strumenti software che integrano le informazioni cartacee in un insieme organico (se il gioco di parole è consentito) di prodotti, dati e strumenti per trovare ciò che serve con un semplice *click* del mouse.



**Fig.1 - Friedrich Konrad Beilstein**

### L'ideatore

Il Beilstein, (il manuale cartaceo, non il chimico tedesco) o più correttamente il "Beilstein Handbook der Organischen Chemie" dal nome del suo ideatore, **Friedrich Konrad Beilstein** professore di Chimica Organica (San Petersburg, 1838-1906), è dato alle stampe la prima volta nel 1881, completo di 1500 composti e 2200 pagine. Più volte aggiornato nel corso degli anni, dall'autore fino alla terza edizione, in seguito dalla Società Chimica Tedesca e poi dal Beilstein Institute è, oggi, una delle più autorevoli fonti d'informazione sulle proprietà fisiche, sulla sintesi e sulle reazioni dei composti organici.

Quest'opera di dimensioni colossali ha visto nel 1995 la sua quinta edizione, in Inglese, formata da qualcosa come quattrocentottanta volumi per circa 400.000 pagine. Tralasciamo pure il fatto che l'Inglese sia una delle lingue più sintetiche in assoluto; sorvoliamo sulla necessità di studiare in maniera approfondita il metodo di classificazione utilizzato, un paio di tomi di indici e tre volumi di istruzioni per cominciare ad ottenere qualche risultato sensato. È in ogni caso innegabile che quest'oggetto, di per sé imponente e di bellissima presenza in qualunque biblioteca che si rispetti sia, di fatto, assai poco maneggevole.



**Fig.2 - I 480 volumi del Beilstein Handbook**

### Il Prodotto

Nel 1988 la *Beilstein Informationssysteme GmbH* ha realizzato una versione online della propria collana, disponibile anche su STN e DIALOG e quindi commercializzata nel 1994 con i nomi CrossFire e CrossFire<sub>plus</sub>Reactions: in pratica un database elettronico contenente i dati dell'opera cartacea completa, integrato da un sistema di ricerca di tipo client-server con un'interfaccia grafica di facile approccio e comprensione.



Nel corso degli anni il prodotto ha subito la continua evoluzione, presentandosi oggi come un oggetto fondamentale per le istituzioni di ricerca in ambito chimico. L'innovazione concettuale di questo prodotto gli ha consentito di vincere lo "European Information Technology Prize" per il 1997, premio dell'Unione Europea assegnato annualmente ai 25 prodotti di più alto contenuto di "Information Technology".



### CrossFire<sub>plus</sub> Reactions

CrossFire<sub>plus</sub>Reactions è la realizzazione di una visione della chimica che in qualche modo superi le barriere tra sostanze (molecole e proprietà), reazioni e citazioni. La possibilità fornita da questo prodotto è di cercare le informazioni a prescindere dalla loro natura e nel modo più intuitivo (o comodo) per il ricercatore, in maniera che il formato di queste si adatti al tipo di richiesta realmente effettuata. Per le **sostanze**, informazione base presente in CrossFire, l'utilizzatore può accedere a più di sei milioni di strutture e a tutti i riferimenti relativi, siano essi proprietà

chimiche, fisiche, metodi di preparazione, comportamenti chimici o riferimenti in letteratura. Il sistema presenta i riferimenti bibliografici come *hyperlink*, direttamente raggiungibili con lo stesso meccanismo usato dai tutti i *browser* per navigare su Internet, quindi particolarmente intuitivo. Per le **reazioni**, il sistema di ricerca è stato esteso fino ad includere anche le sottostrutture: è possibile definire il ruolo di una struttura o sottostruttura all'interno della reazione e ricercare utilizzando attributi della reazione stessa, quali ruolo di un composto in una reazione, legami creati o rotti e mappa degli atomi in un prodotto provenienti da un preciso materiale di partenza. I riferimenti o **citazioni** sono mantenuti in un dominio separato del database e ciò facilita sia la loro ricerca esclusiva sia la visualizzazione in un contesto di sole citazioni. La ricerca è possibile per parti di nome chimico, numero di registro, valore di

alcune proprietà (es.: punto di fusione in un intervallo determinato), anno di pubblicazione, nome dell'autore e così via.

L'interrogazione avviene dal proprio PC, sia esso MS Windows o Macintosh, tramite una parte *client* del prodotto, chiamata **Beilstein Commander** di cui si può vedere una schermata d'esempio nella Figura 3 di questa pagina. È possibile trovare i requisiti hardware e software necessari per il proprio Personal alla pagina:

[http://www.beilstein.com/products/xfire/xf\\_technical.html](http://www.beilstein.com/products/xfire/xf_technical.html).

Va ricordato, infine, che il database vero e proprio è aggiornato *dal Beilstein Informationssysteme GmbH*, mediante il rilascio periodico, in generale ogni trimestre, di nuove versioni inviate a chi gestisce la parte server del prodotto, in questo caso il CILEA.

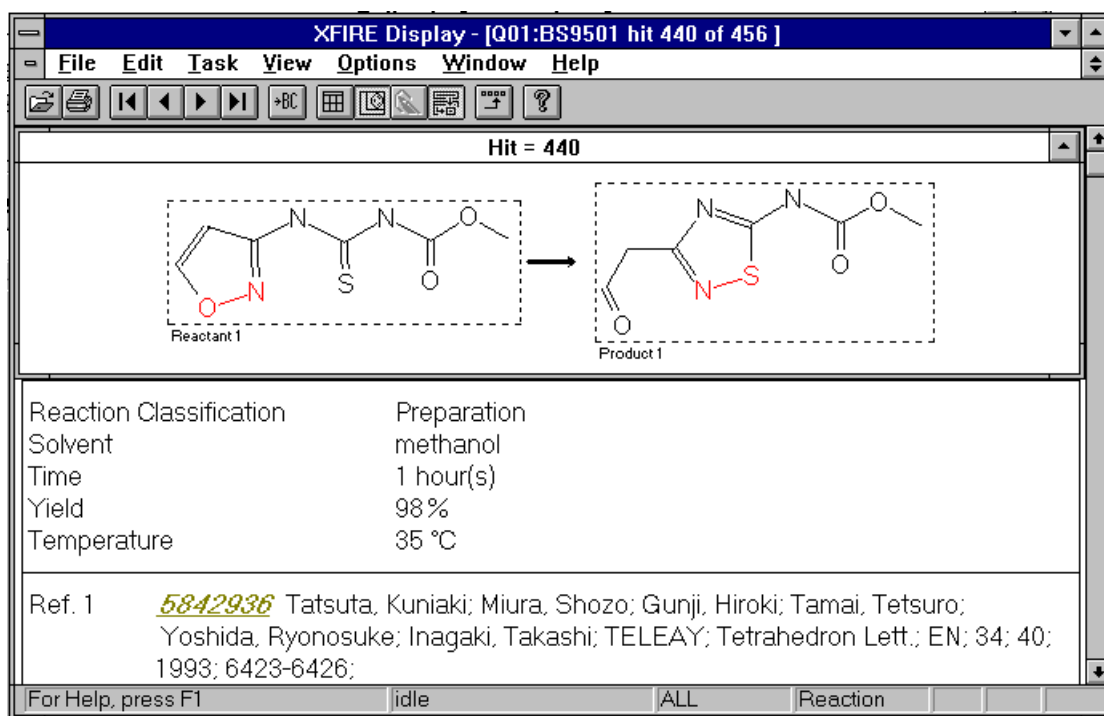


Fig. 3 - Esempio di Beilstein Commander su PC.

### Il CILEA ed il Consorzio Italiano CrossFire

Nato da un'idea del Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università Statale di Milano, nella persona del Prof. Carlo Scolastico, è in fase di completamento il Consorzio Italiano CrossFire (CIC) che consen-

tirà di condividere i benefici (e ovviamente i costi) del database CrossFire<sub>plus</sub>Reactions tra tutti i ricercatori delle università italiane che vi aderiscano. Il CILEA farà da tramite, sia tecnico sia amministrativo tra i partecipanti al Consorzio e il *Beilstein Informationssysteme GmbH*.

I servizi del CILEA oltre ad essere di coordinamento amministrativo, saranno quelli fondamentali di accesso al database *CrossFire<sub>plus</sub>Reactions* vero e proprio, residente su un server dedicato esclusivamente a questo progetto, secondo i requisiti di robustezza ed affidabilità, piuttosto pesanti, richiesti dal prodotto.

I tecnici del CILEA si occuperanno completamente delle fasi di installazione, test e attivazione del programma; degli aggiornamenti periodici, della messa a disposizione, installazione e configurazione della parte *client*, dell'assistenza tecnica tramite servizi di help-desk, sia telefonica sia via rete.

### **Hardware & Software**

L'elaboratore scelto per sostenere il carico di *CrossFire*, in accordo con i tecnici del *Beilstein*, è una Workstation RS/6000 IBM, con sistema operativo AIX 4.2, 128 Mbyte di memoria centrale (RAM), doppia interfaccia di rete, Ethernet a 10 Mbit/s e FDDI a 100Mbit/s e moltissimo spazio disco: 43 Gbyte effettivi in una soluzione di tipo RAID 5. Vale la pena di soffermarsi brevemente su questa tecnologia: RAID livello 5 è un servizio "sprecone" perché, usa N dischi ma ne mette a disposizione uno in meno, N-1; ad esempio noi abbiamo 6 dischi da 9 Gbyte ciascuno, invece dei 54 Gbyte teorici, disponiamo "solo" di poco meno di 45, visti come un unico, gigantesco, disco fisso, con velocità di accesso veramente notevole. L'apparente spreco di spazio consente di cautelarsi nel caso di guasti hardware, eventi rari ma non impossibili e, come ricordato da apposite leggi statistiche<sup>3</sup>, destinati a presentarsi nelle situazioni più dannose per l'utente medio. Duplicando alcune informazioni cruciali sugli N dischi, una soluzione RAID5 consente la sostituzione di un disco guasto senza interruzione di servizio (tecnicamente *hot swapping*). La configurazione scelta dal CILEA può contare, inoltre, sulla doppia alimentazione elettrica ridondante (è consentito il guasto ad uno dei due alimentatori elettrici, senza perdita di funzionalità dei dischi). Il sistema è infine modulare per consentirne eventuali ampliamenti, visto che il prodotto occuperà 30 Gbyte di spazio disco, ma con una crescita prevista tra i quattro e gli otto Gb nel corso del 1998.

<sup>3</sup> Si veda ad esempio "La legge di Murphy" Aut. Arthur Bloch, Ed. Longanesi & C.

### **I Servizi**

Saranno organizzati, a cura del CILEA, dei servizi d'addestramento all'utilizzo della parte *client*, in collaborazione con il *Beilstein*.

Sono già previste delle pagine informative e di guida al servizio sul WEB Server del Consorzio, da utilizzare come punto di contatto principale tra il CILEA ed il CIC.

Tra i servizi ulteriori previsti dal CILEA, per completare quest'offerta per la Ricerca Chimica Italiana, vi sono anche liste di posta elettronica per la richiesta d'informazioni e di diffusione di notizie d'interesse generale per gli utenti del CIC.

### **Ma è gratis, per tutti ?**

Evidentemente **no**, uno sforzo del genere non può essere gratis: il costo di *CrossFire<sub>plus</sub>Reactions* non è proprio basso, anche se il *Beilstein Informationssysteme GmbH* è riuscito a contenere la richiesta economica per l'anno in corso entro limiti ragionevoli, anche per l'evidente speranza di acquisire un cliente rilevante quale una grossa parte della comunità chimica italiana. Ai costi puri del software vanno aggiunti quelli dell'elaboratore e del personale del CILEA, necessario per installazione, configurazione e assistenza sul prodotto. Con un'ipotesi iniziale di quaranta accessi distinti (o *seat*), il costo annuo, per il 1998, del singolo posto di lavoro raggiunge i quattro milioni; certo non nullo, ma ragionevole per utilizzare un servizio d'alta qualità come questo. Nel tipo di servizio offerto va precisato infine che *Beilstein* richiede esplicitamente che l'accesso sia riservato esclusivamente al mondo della ricerca, e che tale controllo sia particolarmente rigoroso.

### **Con chi prendere contatto**

Per informazioni sul CIC, ci si può rivolgere a:

- *Prof. Carlo Scolastico*  
*Dott.ssa Anna Bernardi*  
Università degli Studi di Milano  
Dipartimento di Chimica Organica e Industriale - tel. 02/2367593  
e-mail: [anna.bernardi@unimi.it](mailto:anna.bernardi@unimi.it)
- *Ing. Giovanni Meloni*  
CILEA - tel. 02/26995232  
e-mail: [meloni@cilea.it](mailto:meloni@cilea.it)
- *Dott. Gianpiero Limongiello*  
CILEA - tel. 02/26995264  
e-mail: [ligian@cilea.it](mailto:ligian@cilea.it)