

ELITE

El Centro de Supercomputación diseña fármacos para sida, malaria y gripe aviar

El Centro de Supercomputación de Galicia duplica los recursos de cálculo con los que participa en dieciocho superredes ▶ Toma parte en grandes proyectos destinados a diseñar fármacos para la malaria, el sida o la gripe aviar

HENRIQUE NEIRA • SANTIAGO

Diseñar un fármaco hoy en día es un proceso que no sólo se hace en los laboratorios como antaño, pues la utilización de sistemas informáticos permite simular el comportamiento de los mismos en el cuerpo humano, reduciendo los experimentos con personas y acortando al mismo tiempo el período de desarrollo.

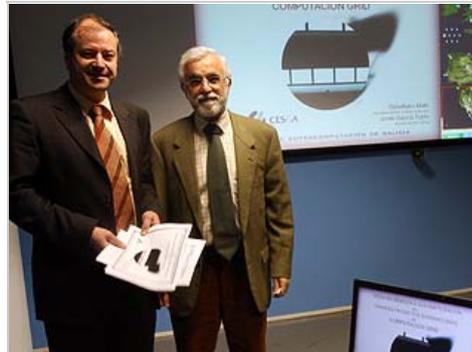
Lo que sucede es que cuando los científicos se enfrentan a enfermedades muy complejas como el sida, la malaria o la gripe aviar, los cálculos necesarios para experimentar y diseñar posibles fármacos que frenen o eventualmente curen estas enfermedades requieren una enorme potencia, tanta que fácilmente excede la de un superordenador. La solución a esto pasa por la realización de estos cálculos en múltiples ordenadores y superordenadores, y ello puede hacerse gracias a las redes de computación distribuida o grid.

El Centro de Supercomputación de Galicia (Cesga) está involucrado en dieciocho redes grid: seis en la comunidad gallega, otras tantas a nivel estatal y seis más internacionales. Según explicó el director gerente del centro, Javier García Tobío, en una de estas últimas, la red europea EGEE2, participan "investigadores de todo o mundo ó redor dun proxecto para probar un novo fármaco contra a malaria, e xa pediron capacidade de cálculo para xuño ou xullo".

Para participar en los múltiples proyectos grid en los que está asociado, el Cesga duplicó en diciembre su capacidad de cálculo para estas tareas, pasando de dos billóns de operacións de coma flotante por segundo (Tflops) a más de cuatro.

El sistema, que costó 120.000 euros y que se presentó en público ayer, fue servido por la empresa Dell y ya está operativo. Así, cuenta con 288 núcleos de proceso -procesadores de Intel-, 144 Gb de memoria RAM y 4.500 Gb de memoria en disco, y funciona bajo *software* libre.

Con todo, el diseño y experimentación de fármacos es solamente una de las cosas que se pueden hacer en las redes grid. Así, conforme explicó el director xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación de la Xunta, Salustiano Mato, el Cesga participa en otros interesantes proyectos, entre ellos el diseño "dunha rede de alerta" de riesgos de inundación que se experimenta en Europa y que, en el futuro, podría permitir tomar decisiones con rapidez y evacuar a la población de los lugares amenazados por las crecidas. Este proyecto parte del establecimiento de una red de estaciones que proporcionan datos del caudal del río en tempo real, datos que se combinan con los de las predicciones meteorológicas.



El director xeral de I+D+i y presidente del Cesga, Salustiano Mato, izquierda, y Javier García Tobío
FOTO: R.Escuredo

■ LOS DATOS

Utilidades Salustiano Mato recordó que la capacidad de cálculo de las redes grid también se emplea en la creación de "tratamientos personalizados de radioterapia, conferencias internacionais ou cursos a distancia".

"Software" libre En parte, el éxito de las redes grid se debe a la utilización del *software* libre en los equipos informáticos. Como recordó Javier García Tobío, sin *software* libre "non habería diñeiro para pagar 20.000 licenzas" para otras tantas máquinas que componen alguna de las redes grid más grandes.

Retos A pesar de la existencia de varias redes grid internacionales, existen aún grandes retos científicos para cuyo estudio no existe todavía en el mundo capacidad de cálculo suficiente. Se trata, apuntó García Tobío, de desafíos como hacer "unha predición meteorolóxica para todo o planeta ou simular o movemento das masas oceánicas".

Compartir Los recursos que proporciona el Cesga a redes grid son utilizados en proyectos que beneficiarán a muchas personas en todo el mundo, y al tiempo la comunidad gallega de investigadores puede usar los que las otras entidades participantes ponen a disposición de las redes grid. Todos los centros participantes se benefician de un modo u otro

