

OS SUPERORDENADORES DO CESGA DAN SOPORTE DE CÁLCULO A UN PROXECTO PARA COMBATER A MALARIA

Santiago de Compostela, 4 outubro 2005.-Atopar novos fármacos para loitar contra a malaria facendo uso dunha rede de computadores situados en 15 países é o obxectivo dun proxecto que lideran o Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing de Alemaña e o Corpuscular Physics Laboratory de Clairmont Ferrand, en Francia, e que conta co apoio de 38 institucións de todo o mundo, entre elas o CESGA.

A malaria causa actualmente a morte de preto dun millón de persoas ao ano, a inmensa maioría delas nos países máis pobres. Esta doenza resulta cada vez máis difícil de curar debido a que o parásito que a provoca se está a volver resistente contra a cloroquina, o medicamento máis extendido para combater esta enfermidade, e tamén a que o mosquito que a transmite é resistente aos insecticidas comúns.

Para facer fronte a estes problemas púxose en marcha un proxecto que responde ao nome de WISDOM (que é acrónimo de Wide In Silico Docking On Malaria, pero que tamén significa sabedoría en inglés), e que ten como obxectivo unir a potencia de milleiros de computadores distribuídos por todo o Planeta coma se fosen un único supercomputador virtual, e empregala para deseñar fármacos por ordenador.

O descubrimento de novos fármacos será posible grazas a unha aplicación informática denominada Drug Discovery, desenvolvida polo Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing de Alemaña e polo Corpuscular Physics Laboratory de Clairmont Ferrand, en Francia. Drug Discovery permite simular por ordenador como reaccionará unha determinada proteína ao unirse cunha molécula, así como determinar se esta reacción permitirá frenar a evolución dunha enfermidade.

No caso da malaria, esta investigación xerou unha cantidade de datos equivalente á capacidade duns 1500 CDs. Esta información debe ser procesada, clasificada e ordenada para poder seleccionar aquelas moléculas que se mostrasen máis eficaces, e que se empregarán para deseñar novos fármacos. Por este motivo, é necesaria a colaboración do Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e doutras 37 institucións de todo o mundo que aportan os seus recursos informáticos e de almacenamento.

Os científicos involucrados neste proxecto prevén que a incorporación desta aplicación informática no deseño de fármacos permitirá tanto acortar os tempos destinados a producir novos medicamentos como abaratar os custos de deseño dos mesmos.

Aínda que inicialmente esta rede de ordenadores se destinou á investigación en fármacos contra a malaria, non se descarta empregar este mesmo sistema na procura de remedios contra outras enfermidades.

O proxecto EGEE: unha rede de ordenadores para a ciencia

Esta investigación desenvólvese no marco do proxecto EGEE (Enabling Grids for e-Science), unha iniciativa, na que participa activamente o CESGA, e que ten por obxectivo facilitar o acceso a investigadores e empresas de todo o mundo a importantes recursos computacionais, independentemente da súa localización

xeográfica. Isto lograrase mediante a creación da maior rede *grid* de ordenadores existente ata o momento.

En España, ademais dos computadores do CESGA, participan neste esforzo por descubrir novas moléculas que permitan unha máis eficaz loita contra a malaria, máquinas xestionadas polas seguintes institucións: CIEMAT, CNB-UAM, IFCA (CSIC), IFIC (CSIC), INTA, PIC, UNIZAR e UVP-GryCAP

Para máis información, contactar co departamento de comunicación do Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) no número de teléfono 981 56 98 10