

Projeto 'Amiloide' fez rastreio virtual de 2,3 milhões de compostos na plataforma Ibercivis

O projeto 'Amiloide', que visa a procura de fármacos capazes de estabilizar a proteína comum a várias doenças neurodegenerativas, testou virtualmente cerca de 2,3 milhões de compostos na plataforma de computação voluntária Ibercivis, foi revelado hoje.

Numa sessão no Museu da Ciência da Universidade de Coimbra (MCUC), em que foi apresentada a Ibercivis, o investigador Carlos Simões revelou que foi feito o "rastreo virtual" de cerca de 2,3 milhões de compostos, utilizando os recursos computacionais daquela plataforma ibérica.

"Chegámos a três compostos que são interessantes e que, se forem otimizados quimicamente, podem ser eficazes na estabilização da transtirretina [a proteína presente na Doença dos Pezinhos]", explicou à Agência Lusa no final da sessão.

O projeto 'Amiloide: Em Busca de Fármacos contra Doenças Neurodegenerativas' foi lançado no verão de 2009.

Desenvolvido no Centro de Neurociências e Biologia Celular (CNC) da Universidade de Coimbra, "é o primeiro projeto português implementado na Ibercivis", uma plataforma de computação voluntária que permite a participação dos cidadãos na investigação científica "de uma maneira direta e em tempo real".

Lançada em Espanha, a Ibercivis pretende envolver o maior número possível de cidadãos na computação voluntária, usando a capacidade de cálculo do computador em momentos de inatividade para realizar as tarefas associadas a um projeto de investigação científica, segundo o portal acerca da iniciativa.

"Lançámos cerca de 6,5 milhões de unidades de trabalhos, recebemos cerca de 5,8 milhões, das quais 5,5 milhões foram processadas com sucesso", disse Carlos Simões na sessão a propósito dos testes virtuais feitos aos compostos.

O coordenador nacional da Ibercivis e coordenador do 'Amiloide', Rui Brito, referiu que os voluntários instalam um programa no seu computador e, quando há disponibilidade, um dos servidores da plataforma envia um trabalho para este fazer os cálculos necessários.

A Ibercivis "aproxima os cidadãos da investigação e torna-os participantes ativos na produção de conhecimento científico. Ao mesmo tempo, fornece à comunidade científica uma poderosa ferramenta de cálculo", lê-se no portal.

Apresentado na sessão, o novo projeto português da Ibercivis, 'Solúvel' (da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto), vai testar a solubilidade de compostos a partir da sua estrutura molecular.

Trata-se de "um processo que envolve um grande número de simulações, apenas possível numa plataforma de computação avançada como a Ibercivis", disse Miguel Jorge, coordenador do projeto.

"O método que usamos é a simulação molecular. Recria-se uma experiência virtual no computador. Se não tivéssemos a Ibercivis, iria durar 60 anos [a realizar os testes num só computador]", adiantou.

O presidente da UMIC-Agência para a Sociedade do Conhecimento, Luís Magalhães, o coordenador técnico da Ibercivis, Alejandro Rivero (Universidade de Saragoça), Cândida Silva (CNC) e o diretor do MCUC, Paulo Gama Mota, foram os restantes oradores na sessão.