

Caso de Estudo ALICE2

Mylims: Uma destacada experiência para o tratamento de dados e a manipulação de espectros de Ressonância Magnética Nuclear, aberta, gratuita e on-line

Por meio das redes avançadas da América Latina, a RedCLARA, e da Europa, GÉANT, um grupo de pesquisadores desenvolveu um aplicativo aberto para toda a comunidade científica. Cinco anos depois, a iniciativa

tem sido aplicada com grandes resultados em âmbitos como o café e a medicina, conta com usuários habituais, é utilizada na área da educação e tem sido o ponto de partida para outros projetos.

“Esta plataforma permite que os dados adquiridos sejam compartilhados, mas não somente os dados, também a análise destes dados. Para isso é necessário poder extrair da maneira mais eficiente a informação obtida com as experiências de RMN (Ressonância Magnética Nuclear). Essa informação permite entender em escala atômica a composição de uma amostra. Desse modo, permitimos que equipamentos que custam mais de um bilhão de pesos trabalhem de forma contínua e não somente durante os horários úteis”, explica o químico e pesquisador Julien Wist, que, com o apoio de Luc Patiny, da Suíça, e Edgar Daza e Cristián Blanco, na Colômbia, ideou e echó a andar Mylims (My Laboratory Information Management System- Meu Sistema de Gestão de Informação de Laboratório).

A iniciativa disponibiliza para a comunidade acadêmica uma potente ferramenta que permite processar de forma livre, aberta e de qualquer computador conectado à Internet, os dados, manipular os espectros, interpretar os resultados e depois compará-los com os espectros obtidos por outros



usuários, que são armazenados em bancos de dados.

Os aplicativos de Mylims abrangem trabalhos no campo da química e a medicina. Desta forma, de acordo com Wist, ter acesso a este tipo de informação permite por exemplo a identificação dos compostos presentes numa mistura, comparar duas misturas entre elas ou diagnosticar doenças. *“Nosso grupo conseguiu construir um sistema especialista para detectar fraudes no café e detectou vários casos reais para a indústria nacional*

(Almacafé). Também permite comparar extratos de células saudáveis e extratos de células leucêmicas (colaboração com o grupo de Ismael Samudio, Javeriana Bogotá), e esperamos que permita encontrar quais compostos, biomarcadores, são responsáveis pela ou evidenciam a doença. Além disso, existem diagnósticos pré-natais por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e vários exames que detectam doenças a partir da urina usando RMN para identificar anormalidades, graças ao trabalho pioneiro de um grupo de cientistas do Imperial College de Londres”, acrescenta.

Os resultados desta experiência?

Wist afirma: “Existem por volta de duzentos usuários que trabalham todos os dias com nosso sistema. Existem desenvolvedores que querem subir a bordo e usar nossa ferramenta para unificar a análise de dados espectroscópicos. Existem cursos virtuais baseados na nossa ferramenta e usando nossos dados. Três empresas financiam nosso esforço. Temos um projeto financiado na Europa que envolve 6 grupos de 6 países para continuar desenvolvendo no assunto da RMN de sólidos. São mais de dois mil cliques diários sobre nossas ferramentas, somos primeiros no Google (em nmrdb.org descrevemos as ferramentas do lims) à frente de programas muito reconhecidos, nosso artigo sobre simulação de espectros foi o mais baixado da revista *Journal of Magnetic Resonance* durante dois meses, o pôster do meu estudante Andrés Mauricio Castillo foi premiado no ano passado... e ainda gostamos daquilo que fazemos!



Rede em uso

Para o desenvolvimento do projeto, a equipe utilizou a conexão da rede nacional da Colômbia, RENATA, com a RedCLARA: “Este procedimento não faria nenhum sentido sem uma rede veloz. Estamos falando sobre espectros de ressonância que podem pesar até 128 Mb e a ideia é trabalhar com eles em rede; isto é, que naquele momento têm de ser subidos e baixados idealmente em menos do que segundos e não seria possível sem uma rede de ultra alta velocidade”, aponta Julien Wist, e acrescenta: “queremos aproveitar a computação sobre grades para poder prever uma certa quantidade de propriedades para cada molécula; isto também requer uma conexão boa”.

mylims.org

O site conta com um tour guiado, informação sobre seu uso (aplicável em ambientes de e- educação) e um seção de perguntas frequentes que inclui informação sobre o funcionamento da plataforma, os requerimentos do sistema e os exercícios.

Mais informação:

<http://www.mylims.org>
<http://www.nmrlab.org/>

RENATA: <http://www.renata.edu.co/index.php/component/content/article/5-noticias/2525-colombia-tiene-una-de-las-mas-altas-cobertura-en-banda-ancha-de-america-latina-hecho-que-tenemos-que-aprovechar-para-educar-y-hacer-ciencia.html>

É muito importante manter uma rede de alta velocidade de transmissão de dados que permita a conexão entre os diferentes atores do processo de análise de amostras utilizando RMN na Colômbia. Uma rede dedicada permite subir os arquivos ao servidor mylims e fazer a análise de maneira rápida. Também nos permite o rápido acesso à base de dados de modo que possamos contrastar os resultados com os já obtidos por usuários anteriores.



Cristian Blanco Tirado, Professor da Escola de Química e Reitor Universidade Industrial de Santander (UIS), Colômbia

Nós estamos desenvolvendo a ciência para reduzir a diferença entre países em desenvolvimento e desenvolvidos, e uma rede de Internet eficiente realmente ajuda. A capacidade de cálculos em grades computacionais oferecida pela GÉANT-RedCLARA foi importante para desenvolver o projeto. Hoje não há mais opção que oferecer excelente conexão, não somente para a pesquisa, mas também para a formação de estudantes.



Luc Patiny, PhD, Diretor de Informação Química Escola Politécnica Federal de Lausana (EPFL), Suíça

Este projeto é financiado pela União Europeia

Um projeto implementado por RedCLARA

